

Berechnung der quantenmechanischen Resonanzen in n -Disc-Systemen

Bachelorarbeit



vorgelegt am: 17. Juni 2010

Fachbereich: Physik

Studienrichtung: Allgemeine Physik

Arbeitsgruppe: Quantenchaos

von: Möckel, Sebastian
Marbacher Weg 22
35037 Marburg

Matrikelnummer: 2173425

Gutachter: PD Dr. Ulrich Kuhl
Prof. Dr. Bruno Eckhardt

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Theoretische Grundlagen	6
2.1	n-Disc-Systeme	6
2.1.1	Das 3-Disc-System	6
2.2	Quantenmechanische Streutheorie	7
2.3	S -Matrix eines allgemeinen n -Disc-Systems	11
2.4	M -Matrix des 3-Disc-Systems	13
2.4.1	M -Matrix des symmetriereduzierten 3-Disc-Systems	14
2.5	Dimensionen	17
2.5.1	Hausdorff-Dimension	17
2.6	Fraktales Weyl-Gesetz	18
3	Mikrowellen Experimente	19
3.1	Experimentelle Realisierung des symmetriereduzierten 3-Disc-Systems	20
4	Numerische Berechnungen	22
4.1	Vorbetrachtungen	22
4.2	Struktur des Programmes	23
4.3	Ergebnisse	26
4.3.1	Resonanzen des 3-Disc-Systems	26
4.3.2	Resonanzen des symmetriereduzierten 3-Disc-Systems	29
4.3.3	Hausdorff-Dimension des 3-Disc-Repellers	31
A	Herleitung der S-Matrixdeterminante	36
A.1	Grundlagen	36
A.2	Berechnung der Greenfunktion	37
A.3	Berechnung der $\psi_m^k(\vec{r})$	40

A.4	Berechnung der S -Matrix	57
A.5	Berechnung von $\det_l S^{(n)}$	58
B	Genauigkeitsabschätzungen der Numerik	64
B.1	Konvergenzverhalten der Matrixdeterminanten	64
B.2	Genauigkeit der Besselfunktionen	66
B.3	Vergleich der numerischen Rechnung	67

Abbildungsverzeichnis

2.1	3-Disc-System	14
2.2	Schematische Darstellung der Elemente der C_{3v} -Symmetriegruppe	16
3.1	Billard des symmetriereduzierten 3-Disc-Systems	20
3.2	Experimenteller Aufbau des symmetriereduzierten Systems	21
4.1	Programmablaufskizze	24
4.2	Contour-Plot der Funktion $1/\det \tilde{M}^{(A_1)}(k)$	25
4.3	A_1 Resonanzen	26
4.4	A_2 Resonanzen	27
4.5	E Resonanzen	27
4.6	A_2 Resonanzen für verschiedene R/a	28
4.7	Numerisch ermittelte Resonanzen sowie gemessene Resonanzen	29
4.8	Stabilität der Resonanzen	30
4.9	Integrierte Zustandsdichte der A_2 -Darstellung für $R/a = 6.0$	31
4.10	Logarithmierte integrierte Zustandsdichte der A_2 -Darstellung für $R/a = 6.0$	32
4.11	Exponent $d_H + 1$ in Abhängigkeit von R/a	33
4.12	Exponent $d_H + 1$ in Abhängigkeit von C für $R/a = 4.0, 5.0, 6.0$ und 6.8	34
A.1	Infinitesimale Verschiebung des Integrationsbereiches	41
A.2	Skizze des Integrationsbereiches	43
A.3	Skizze der Vektoren \vec{X}_j , \vec{R}_j , \vec{a}_j und Winkel φ_{X_j} , φ_{R_j} sowie φ_j	45
A.4	Skizze der Vektoren $X_j^{(j)}$, \vec{s}_j und des Winkels $\varphi_j - \varphi_{s_j}$	46

A.5	Skizze der Vektoren $\vec{X}_j^{(j')}$, $\vec{s}_{j'}$, $\vec{X}_j^{(j')} - \vec{s}_{j'}$ und der Winkel $\varphi_{s_{j'}}$ sowie $\varphi_{jj'}$	47
A.6	Skizze der Vektoren $\vec{X}_j^{(j')}$ und der Winkel $\gamma_{j'}$ sowie $\alpha_{jj'}$	48
A.7	Skizze der Vektoren $\vec{X}_j^{(j')}$, \vec{a}_j , des Disc-Abstandes $R_{jj'}$ und der Winkel $\gamma_{j'}$, $\alpha_{jj'}$, φ_j sowie $\alpha_{j'j}$	49
A.8	Skizze der Vektoren $\vec{r}^{(j)}$, \vec{s}_j , $\vec{r}^{(j)} - \vec{s}_j$ und des Winkels $\varphi_{s_j} - \varphi_{r^{(j)}}$	54
A.9	Skizze der Vektoren \vec{r} , $\vec{r}^{(j)}$, des Betrags R_j und der Winkel $\varphi_r - \varphi_{R_j}$ sowie $\varphi_{r^{(j)}}$	55
A.10	Skizze der Vektoren \vec{R}_j , $\vec{R}_{j'}$, $\vec{R}_{j'j}$ und Winkel $\varphi_{R_{j'}} - \varphi_{R_j}$, δ , $\alpha_{j'j}$ sowie $\alpha_{jj'}$	59
B.1	Konvergenzverhalten von $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ und $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ in Abhängigkeit von R/a	64
B.2	Konvergenzverhalten von $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ und $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ in Abhängigkeit von ka	65
B.3	Vergleich der berechneter Resonanzen mit Gaspard und Rice, 1988	67

1. Einleitung

In der klassischen Mechanik ermöglicht die Betrachtung der Teilchen-Trajektorien eine Unterscheidung zwischen integrablen und nicht integrablen Systemen. Das exponentielle Auseinanderlaufen geringfügig abweichender Trajektorien stellt hierbei einen deutlichen Hinweis auf ein chaotisches, d.h. nicht integrables Verhalten des Systems dar, wohingegen in integrablen Systemen lediglich eine lineare Abdrift benachbarter Trajektorien beobachtet werden kann. Des Weiteren sind vollchaotische Systeme ergodisch, d.h. das System kommt jedem möglichen Realisierungszustand innerhalb hinreichend großer Zeitspannen beliebig nahe. Im Gegensatz dazu formen reguläre Trajektorien im Phasenraum einen multidimensionalen Torus, da hier die Anzahl der Bewegungskonstanten mit der Anzahl der Freiheitsgrade übereinstimmt. Die Terminologie des Chaos bleibt nicht auf klassische Strukturen beschränkt. Eine Erweiterung auf quantenmechanische Systeme führte in den vergangenen Jahrzehnten zum Begriff des Wellen- oder Quantenchaos. In dieser Arbeit soll das Problem der chaotischen Streuung eines quantenmechanischen Partikels an einem beliebigen n -Disc-System in der Ebene theoretisch betrachtet und numerisch berechnet werden. Die numerischen Rechnungen werden weiterhin zur Unterstützung eines Experiments verwendet werden, in dessen Rahmen das vorgegebene Problem durch die Reflexion von Mikrowellen innerhalb metallischer Hohlraum-Kavitäten simuliert werden soll.

Wichtige Eigenschaften folgen aus dem Spektrum geschlossener quantenmechanischer Systeme. So lassen sich integrable und nicht integrable Systeme anhand der Auftragung der Eigenwertabstandsverteilung unterscheiden. Die Eigenmoden integrierbarer Systeme sind dabei Poisson-verteilt, da unkorreliert. Bei nicht integrablen Systemen folgt die Abstandsstatistik der Eigenwerte einer sogenannten Wigner-Verteilung. Die integrierte Dichte der Resonanzen, welche der Anzahl der Resonanzen bis zu einer bestimmten Wellenzahl k entspricht, folgt zudem dem sogenannten Weyl-Gesetz. Für große Wellenzahlen zeigt sich dementsprechend ein quadratischer Anstieg der Resonanzanzahl mit k .

Ähnliche Resultate ergibt die Betrachtung offener quantenmechanischer Systeme. Hier tritt anstelle des Weyl-Gesetzes das verallgemeinerte fraktale Weyl-Gesetz. Dieses sagt ein Wachstum der Resonanzanzahl mit k^α voraus, wobei α in direktem Zusammenhang mit der fraktalen Di-

mension des klassischen Repellers steht. Das erste Ziel der vorliegenden Arbeit soll die Herleitung der notwendigen Theorie zur Berechnung der Resonanzen eines allgemeinen n -Disc-Systems sein. Weiterhin werden zu einem vorgegebenen Wellenzahlbereich alle Resonanzen der antisymmetrischen Eigenfunktionen eines 3-Disc-Systems numerisch ermittelt. Die numerisch ermittelten Werte werden anschließend zum Vergleich mit den in einem entsprechenden Experiment gemessenen Resonanzen herangezogen. Außerdem soll die Gültigkeit des fraktalen Weyl-Gesetzes im quantenmechanischen Rahmen, d.h. für geringe Wellenzahlen k , überprüft werden. Der Aufbau dieser Arbeit gestaltet sich wie folgt: Kapitel 2.1 beinhaltet eine grundlegende Charakterisierung von n -Disc-Systemen. In den Kapiteln 2.2 bis 2.4 erfolgt eine Erläuterung der quantenmechanischen Streutheorie, die Herleitung der S -Matrix sowie die Herleitung der M -Matrix für ein allgemeines n -Disc-System. Im Kapitel 2.5 erfolgt eine prägnante Klärung des Begriffs der fraktalen Dimension. Das folgende Kapitel 2.6 befasst sich mit dem Zusammenhang zwischen fraktalem Weyl-Gesetz und der Dimension eines Repellers. Kapitel 3 behandelt den Aufbau des zur Rechnung gehörenden Experiments und das zur Messung der Resonanzen verwendete Verfahren. In Kapitel 4.1 werden die konvergenztechnischen Voraussetzungen an den Algorithmus diskutiert, in Kapitel 4.2 folgt eine kurze Charakterisierung des zur Berechnung der Resonanzen verwendeten Algorithmus, sodass in Kapitel 4.3 die Ergebnisse der numerischen Rechnung in Bezug auf die Resonanzverteilung und die fraktale Dimension des symmetriereduzierten 3-Disc-Systems präsentiert werden können. Alle weiterführenden Rechnungen und eine Darstellung der errechneten Daten sowie eine Genauigkeitsabschätzung des Algorithmus befinden sich im Anhang (Kapitel A und B).

2. Theoretische Grundlagen

2.1. n -Disc-Systeme

Der Begriff des n -Scheiben- bzw. n -Disc-Systems bezeichnet das Modell einer theoretisch unendlich ausgedehnten Ebene in welcher n kreisrunde, harte Scheiben eingebettet sind. Ein klassisches Punktteilchen bewegt sich in dieser Ebene reibungsfrei im zugelassenen Raumbereich, d.h. außerhalb der Scheiben und wird an diesen voll elastisch gestreut. Somit sind die kinetische Energie sowie der Betrag der Teilchengeschwindigkeit Konstanten der Bewegung. Das quantenmechanische Analogon stellt die Streuung einer zweidimensionalen Welle an einem Potential dar, welches am Ort der Scheiben unendlich groß und sonst null ist. Demzufolge transformiert das Streuprobblem in eine Dirichlet-Randwertaufgabe bezüglich der n Disc-Oberflächen.

2.1.1. Das 3-Disc-System

Das drei-Scheiben-System besteht aus drei auf den Spitzen eines gleichseitigen Dreiecks angeordneten Scheiben mit Radius a im Abstand R . Wegen der aufgehobenen Rotationssymmetrie stellt der Drehimpuls nicht länger eine Erhaltungsgröße des Systems dar. Interessant ist die Ausbildung von Trajektorien, welche das System weder für positive und negative Zeiten verlassen. Diese bilden den sogenannten Repeller des Systems. Der Repeller des drei-Disc-Systems besitzt eine fraktale Dimension, bei einem Radius zu Abstands-Verhältnis von $R/a = 6.0$ nimmt die zugeordnete Hausdorff-Dimension (siehe Kapitel 2.5.1) den Wert $d_H = 0,2895$ (aus [8]) an.

2.2. Quantenmechanische Streutheorie

Im quantenmechanischen Modell wird ein Partikel nicht länger durch die ihm zugehörige Phasenraumtrajektorie beschrieben. Anstelle der Bahnkurve tritt nun die sogenannte Wellenfunktion ψ . Die Dynamik des Partikels wird nicht länger durch die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen bestimmt, sondern hängt von der Lösung der zugehörigen Wellengleichung, beispielsweise der Schrödinger-Gleichung (nichtrelat. Limes), der Dirac- oder der Klein-Gordon-Gleichung ab. Im Folgenden werden nur Einteilchen-Probleme im nichtrelativistischen Grenzfall betrachtet, somit hat die Wellenfunktion des Partikels die Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung zu erfüllen. Die Wellenfunktion (im Folgenden stets Ortsdarstellung) entspricht in diesem Rahmen einem quadratintegrierbaren komplexwertigen Skalarfeld dessen Betrags-Amplitudenquadrat $\|\psi(\vec{r})\|^2$ am Ort \vec{r} der Wahrscheinlichkeitsdichte zur Lokalisation des quantenmechanischen Teilchens entspricht. Auch bei der Streuung quantenmechanischer Partikel an beliebigen Potentialen muss wegen der fehlenden Diskretisierung der Partikelposition im Vergleich zur klassischen Streutheorie umgedacht werden.

Es folgt die Betrachtung eines beliebigen zeitabhängigen Teilchenzustandes $|\varphi(t)\rangle$, dessen Zeitverhalten durch den folgenden Hamilton-Operator charakterisiert wird:

$$H = H_0 + H_1$$

Der Hamiltonoperator enthält hierbei sämtliche den Streuvorgang betreffenden Informationen, H_1 ist der Wechselwirkungsoperator zwischen dem Teilchen und dem Streuzentrum. Der sogenannte freie Anteil des Hamilton-Operators $H_0 = p^2/2m$, welcher die Zeitentwicklung für große Abstände zwischen Teilchen und Streuzentrum bestimmt, soll nach Voraussetzung ein kontinuierliches Eigenwertspektrum besitzen:

$$H_0 |E_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |E_n^{(0)}\rangle$$

Hierbei bilden die Eigenzustände $|E_n^{(0)}\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem:

$$\int dn |E_n^{(0)}\rangle \langle E_n^{(0)}| = 1 \quad (2.2.1)$$

$$\langle E_n^{(0)} | E_m^{(0)} \rangle = \delta(n - m) \quad (2.2.2)$$

Nun wird der zeitabhängige Zustand des Teilchens $|\varphi_0(t)\rangle$ für den Zeitpunkt $t = 0$ als Wellenpaket entwickelt, wobei eine Wechselwirkung mit dem Streuzentrum zunächst ausgeblendet wird:

$$\begin{aligned} |\varphi_0(0)\rangle &= \int dn \alpha_n |E_n^{(0)}\rangle; \\ \int dn |\alpha_n|^2 &= 1 \end{aligned}$$

Für die Zeitentwicklung dieses freien Zustandes gilt demnach:

$$|\varphi_0(t)\rangle = e^{-(i/\hbar)H_0 t} \int dn \alpha_n |E_n^{(0)}\rangle = \int dn \alpha_n e^{-(i/\hbar)E_n^{(0)} t} |E_n^{(0)}\rangle$$

Der freie Zustand möge nun für $t \rightarrow -\infty$ mit dem tatsächlichen Zustand $|\varphi(t)\rangle$ übereinstimmen:

$$|\varphi(t)\rangle = \lim_{t' \rightarrow -\infty} e^{-(i/\hbar)H(t-t')} |\varphi_0(t')\rangle$$

Die Untersuchung der Umwandlung des Zustandes $|\varphi(t)\rangle$ lange vor der Streuung ($t \rightarrow -\infty$) in einen Zustand lange nach der Streuung ($t \rightarrow +\infty$) liefert die gesuchte Transformationsvorschrift. Da $|\varphi(t)\rangle$ lange vor und lange nach der Streuung nach Voraussetzung nicht weiter vom Streupotential beeinflusst wird, empfiehlt sich eine Entwicklung für die interessierenden Zeiträume in die Eigenzustände $|E_n^{(0)}\rangle$ des freien Hamilton-Operators H_0 :

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} |\varphi(t)\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} \int dn \alpha_n e^{-(i/\hbar)E_n^{(0)} t} |E_n^{(0)}\rangle \quad (2.2.3)$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\varphi(t)\rangle = \lim_{t \rightarrow +\infty} \int dn \beta_n e^{-(i/\hbar)E_n^{(0)} t} |E_n^{(0)}\rangle \quad (2.2.4)$$

Wobei die Existenz der obigen Grenzwerte für physikalisch vernünftige Potentiale vorausgesetzt wird. Nach Voraussetzung sind die α_n durch die Präparation des Ausgangszustandes bekannt, es gilt nun die Koeffizienten β_n des Endzustandes zu berechnen. Alle weiteren Berechnungen werden unter Verwendung der sogenannten Wechselwirkungsdarstellung (Dirac-Bild) ausgeführt, innerhalb derer die Zeitentwicklung der Zustände vom Wechselwirkungs-Hamiltonoperator H_1 und die der Operatoren von H_0 bestimmt werden. Da sich das Teilchen für $t \rightarrow \pm\infty$ außerhalb des Wechselwirkungspotentials befindet, werden die Grenzübergänge (2.2.3) und (2.2.4) im Dirac-Bild sehr einfach. Die Zustände und Operatoren im Dirac-Bild werden durch den Index D gekennzeichnet.

Die Transformation des Zustandes $|\varphi(t)\rangle$ führt auf:

$$|\varphi_D(t)\rangle = e^{(i/\hbar)H_0 t} |\varphi(t)\rangle$$

Und für die Zeitentwicklung des Zustandes $|\varphi_D(t)\rangle$ folgt:

$$|\varphi_D(t)\rangle = U_D(t, t') |\varphi_D(t')\rangle$$

Mit dem Zeitentwicklungsoperator $U_D(t, t')$ gemäß [7]:

$$U_D(t, t') = e^{(i/\hbar)H_0 t} e^{-(i/\hbar)H(t-t')} e^{-(i/\hbar)H_0 t'}$$

Die Grenzübergänge (2.2.3) und (2.2.4) können nun in der Wechselwirkungsdarstellung durchgeführt werden:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow -\infty} |\varphi_D(t)\rangle &= \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{(i/\hbar)H_0 t} |\varphi(t)\rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{(i/\hbar)H_0 t} \int dn \alpha_n e^{-(i/\hbar)E_n^{(0)} t} |E_n^{(0)}\rangle \\ &= \int dn \alpha_n |E_n^{(0)}\rangle \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

In gleicher Weise folgt:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\varphi_D(t)\rangle = \int dn \beta_n |E_n^{(0)}\rangle \quad (2.2.6)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen zur Zeit t im freien Energiezustand $|E_m^{(0)}\rangle$ befindet, wenn zur Zeit t' der Zustand $|\varphi_D(t')\rangle$ angenommen wurde, berechnet sich aus folgendem Skalarprodukt:

$$\begin{aligned} \langle E_m^{(0)} | \varphi_D(t) \rangle &= \langle E_m^{(0)} | U_D(t, t') | \varphi_D(t') \rangle \\ &= \int dn \langle E_m^{(0)} | U_D(t, t') | E_n^{(0)} \rangle \langle E_n^{(0)} | \varphi_D(t') \rangle \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

Hierbei wurde im letzten Schritt die Vollständigkeitsrelation (2.2.1) benutzt. Ausdruck (2.2.7) beschreibt hierbei die Wahrscheinlichkeitsamplitude für beliebige Zeiten t und t' . Wegen (2.2.5) und (2.2.6) gilt aber wegen der Orthonormiertheit der Energieeigenzustände (2.2.2):

$$\begin{aligned} \lim_{t' \rightarrow -\infty} \langle E_n^{(0)} | \varphi_D(t') \rangle &= \alpha_n \\ \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle E_m^{(0)} | \varphi_D(t) \rangle &= \beta_m \end{aligned}$$

Dies kann in (2.2.7) eingesetzt werden:

$$\beta_m = \int dn \left\langle E_m^{(0)} \left| U_D(+\infty, -\infty) \right| E_n^{(0)} \right\rangle \alpha_n$$

Oder abgekürzt:

$$\beta_m = \int dn S_{mn} \alpha_n$$

Dies entspricht der Definition der in den folgenden Ausführungen so wichtigen Streumatrix S . Für das (m, n) Element der S -Matrix gilt demnach:

$$S_{mn} \equiv \left\langle E_m^{(0)} \left| U_D(+\infty, -\infty) \right| E_n^{(0)} \right\rangle$$

Die Matrixelemente entsprechen demnach asymptotischen Übergangswahrscheinlichkeitsamplituden zwischen den freien Zuständen $|E_n^{(0)}\rangle$ vor und $|E_m^{(0)}\rangle$ nach dem Streuvorgang. Die S -Matrix lässt sich nach jeder vollständigen Hilbertraumbasis, so zum Beispiel auch nach der Drehimpulsbasis, entwickeln.

2.3. S -Matrix eines allgemeinen n -Disc-Systems

In diesem Abschnitt erfolgt eine Berechnungsskizze der S -Matrix eines allgemeinen n -Disc-Systems. Die Grundlagen der Rechnung stützen sich auf die Ausführungen in [11]. Eine detailliertere Rechnung befindet sich im Anhang A. Auf Grund der Streuung einer quantenmechanischen Welle an harten Kugeln/Scheiben transformiert das Problem zu einer Randwertaufgabe. Sei $\psi_m^k(\vec{r})$ eine spezielle Lösung dieser Randwertaufgabe für einer beliebigen Wellenzahl k und eine beliebige Drehimpulsquantenzahl m . $\psi_m^k(\vec{r})$ erfüllt die Schrödinger-Gleichung für \vec{r} außerhalb der Discs:

$$(\Delta_r - k^2) \psi_m^k(\vec{r}) = 0$$

Und es gilt folgende Bedingung für \vec{r} auf den Disc-Oberflächen:

$$\psi_m^k(\vec{r}) = 0$$

In hinreichend großem Abstand zu den streuenden Discs kann die Wellenfunktion der gestreuten Welle folgendermaßen approximiert werden (Anhang A):

$$\psi_m^k(\vec{r}) \propto \frac{1}{\sqrt{2\pi kr}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\delta_{ml} e^{-i(kr - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} + S_{ml} e^{i(kr - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} \right] e^{il\varphi_r} \quad (2.3.1)$$

Hierbei sind r der Betrag und φ_r der Polarwinkel des Vektors \vec{r} im globalen Koordinatensystem. Gleichung (2.3.1) definiert gleichsam den Streuoperator in seiner Drehimpuls-Basis-Darstellung. S_{ml} beschreibt den Streuvorgang einer einfliegenden Welle mit Drehimpulsquantenzahl m zur einer Streuwelle mit Drehimpulsquantenzahl l . Findet keine Streuung statt, so entspricht S_{ml} der Einheitsmatrix. Dadurch lassen sich alle Streuphänomene als Abweichung der Matrix S von der Einheitsmatrix darstellen. Man schreibt: $S(k) = 1 - iT(k)$. Im allgemeinen Fall ist S eine nichtdiagonalisierbare und deswegen nicht separable Matrix. Jedoch kann S für den betrachteten Fall von nicht überlappenden Discs weiter zerlegt werden:

$$\begin{aligned} S_{mm'}^{(n)}(k) &= \delta_{mm'} - iT_{mm'}^{(n)}(k) \\ &= \delta_{mm'} - iC_{ml}^j(k) (M^{-1}(k))_{ll'}^{jj'} D_{l'm'}^{j'}(k) \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Die unteren Indices bezeichnen hierbei die Drehimpuls-Quantenzahlen während die oberen Indices j und j' für die Nummern der entsprechenden Discs stehen. Es gilt die Einsteinsche Summenkonvention.

Die Herleitung der im allgemeinen von der Wahl des globalen Koordinatensystems abhängigen Matrizen C^j und D^j erfolgt im Anhang A:

$$C_{ml}^j = \frac{2i}{\pi a_j} \frac{J_{m-l}(kR_j)}{H_l^{(1)}(ka_j)} e^{im\varphi_{R_j}} \quad (2.3.3)$$

$$D_{l'm'}^{jj'} = -\pi a_{j'} J_{m'-l'}(kR_{jj'}) J_{l'}(ka_{j'}) e^{im'\varphi_{R_{j'}}} \quad (2.3.4)$$

Hierbei sind R_j Betrag und φ_{R_j} Winkel des Vektors vom globalen Koordinatenursprung zum Mittelpunkt von Disc j . $H_l^{(1)}(z)$ bezeichnet die Hankel-Funktion erster Art und $J_l(z)$ die entsprechende gewöhnliche Besselfunktion. Die Matrix $M^{jj'}$ hat folgende Struktur:

$$M_{ll'}^{jj'} = \delta_{jj'} \delta_{ll'} + (1 - \delta_{jj'}) \frac{a_j}{a_{j'}} \frac{J_l(ka_j)}{H_{l'}^{(1)}(ka_{j'})} H_{l-l'}^{(1)}(kR_{jj'}) e^{i(l\alpha_{jj'} - l'(\alpha_{jj'} - \pi))} \quad (2.3.5)$$

$R_{jj'} = R_{j'j}$ ist der Betrag des Vektors $\vec{R}_{jj'}$ vom Mittelpunkt der Disc j' zum Mittelpunkt der Disc j . $\alpha_{jj'}$ ist der Winkel zwischen $\vec{R}_{jj'}$ und $\vec{R}_{j'}$ (siehe Abbildung A.10).

Aus Gleichung (2.3.2) wird ersichtlich, dass die Matrizen C^j bzw. $D^{j'}$ die Kopplung von einfliegender und ausfliegender Streuwelle an das Zentrums jeweilige Streuzentrum beschreiben. Die Kopplung zwischen den verschiedenen Streuzentren wird demnach von Matrix $M^{jj'}$ realisiert. Somit repräsentiert das Produkt $C^j (M^{-1})^{jj'} D^{j'}$ die T -Matrix des n-Disc-Systems. Hierbei wird die Existenz der inversen Matrix $(M^{-1})^{jj'}$ in [11] bewiesen.

Für die Determinante der S -Matrix kann nun folgende Beziehung gefunden werden:

$$\begin{aligned} \det_l S^{(n)} &= \det_l (1 - iCM^{-1}D) = \exp \operatorname{tr}_l \ln (1 - iCM^{-1}D) \\ &= \exp \left(- \sum_{N=1}^{\infty} \frac{i^N}{N} \operatorname{tr}_l [(CM^{-1}D)^N] \right) \\ &= \exp \left(- \sum_{N=1}^{\infty} \frac{i^N}{N} \operatorname{Tr}_L [(M^{-1}DC)^N] \right) \\ &= \exp \operatorname{Tr}_L \ln (M^{-1}DC) = \operatorname{Det}_L (1 - iM^{-1}DC) \\ &= \operatorname{Det}_L (M^{-1}(M - iDC)) \\ &= \frac{\operatorname{Det}_L (M - iDC)}{\operatorname{Det}_L (M)} \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Hierbei wurde die Beziehung $\det(1 + \mu A) = \exp \left(\sum_{N=1}^{\infty} \frac{(-\mu)^N}{N} \operatorname{tr} (A^N) \right)$ aus [11] genutzt, welche für $|\mu| \max |\lambda_i| < 1$ gültig ist, wobei λ_i den i -ten Eigenwert der Matrix A bezeichnet.

Der große Index L in (2.3.6) steht für die Durchführung der zugehörigen Operationen über dem erweiterten Tupel (l, j) der Quantenzahlen und Disc-Nummern. Das kleine l hingegen steht für die Durchführung der Operationen im Raum der Quantenzahlen. Zur besseren Unterscheidbarkeit wurden auch die mathematischen Operatoren Tr_L und Det_L über dem erweiterten Raum groß geschrieben. Gemäß [11] sind alle auftretenden Determinanten unter der Voraussetzung einer endlichen Anzahl von Discs und für positive Realteile von k wohldefiniert. Gleichung (2.3.6) zeigt, dass die gesuchten Pole der S -Matrix-Determinante genau den Nullstellen der M -Matrix-Determinante entsprechen.

2.4. M -Matrix des 3-Disc-Systems

Aus der Beziehung (2.3.5) für die Form der M -Matrix bezüglich eines allgemeinen n -Disc-Systems lässt sich die M -Matrix eines 3-Disc-Systems ableiten. Für eine symmetrische Anordnung der Scheiben gemäß Abb. 2.1 sowie gleiche Radien a für alle Discs lautet die M -Matrix des Systems wie folgt:

$$M_{ll'}^{jj'} = \delta_{jj'} \delta_{ll'} + \frac{J_l(ka)}{H_{l'}^{(1)}(ka)} H_{l-l'}^{(1)}(kR) \zeta_{jj'}(l, l') \quad (2.4.1)$$

Der Faktor $\zeta_{jj'}(l, l')$ weist dabei folgende Winkelabhängigkeit auf.

$$\zeta_{jj'}(l, l') = (1 - \delta_{jj'}) e^{i(l\alpha_{jj'} - l'(\alpha_{jj'} - \pi))}$$

Aus Abb. 2.1 lässt sich ablesen, dass $\zeta_{jj'}(l, l')$ im symmetrischen Fall eine einfache Struktur aufweist.

$$\begin{aligned} \zeta_{jj}(l, l') &= 0 \\ \zeta_{j'j}(l, l') &= \zeta_{jj'}^*(l, l') \\ \zeta_{12}(l, l') &= \zeta_{23}(l, l') = \zeta_{31}(l, l') = e^{(i\pi/6)(5l-l')} \end{aligned}$$

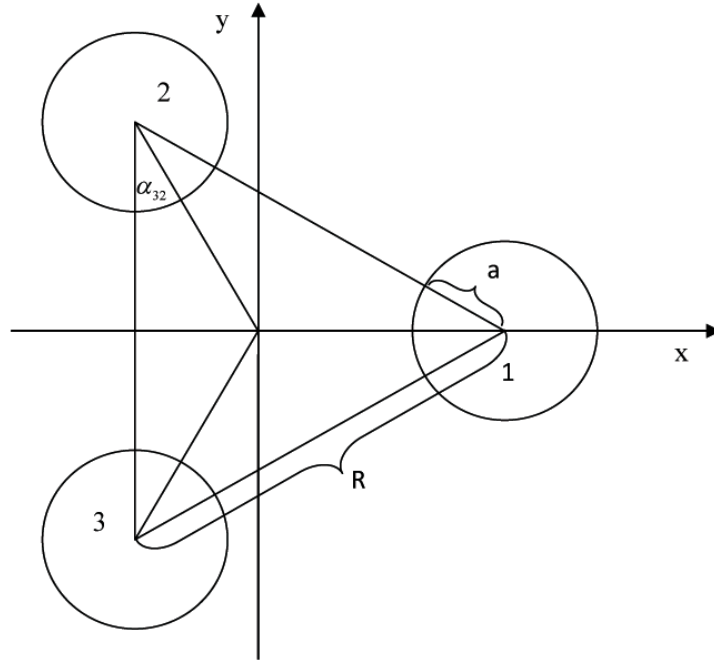


Abbildung 2.1.: 3-Disc-System, der Winkel α_{32} wurde exemplarisch eingezeichnet

2.4.1. M -Matrix des symmetriereduzierten 3-Disc-Systems

Speziell für den Fall eines 3-Disc-Systems, wobei alle Discs den gleichen Radius aufweisen sollen und auf den Ecken eines gleichseitigen Dreiecks angeordnet sind, lässt sich die allgemeine Form der M -Matrix auf Grund der systembedingten Symmetrie weiter reduzieren. Die M -Matrix kann in 3 quadratische Matrizen A_1 , A_2 und E zerlegt werden. Entsprechend der Argumentation in [4] zeigt das Streuprobblem eine Invarianz unter den Operationen der Symmetriegruppe C_{3v} mit den Elementen $\{I, A, B, K, L, M\}$ (Abb. 2.2). Dieser Gruppe liegen drei irreduzible Darstellungen zugrunde: die symmetrische Darstellung A_1 der Dimension 1, die antisymmetrische Darstellung A_2 der Dimension 1 und die Darstellung E der Dimension 2.

So kann der in (A.3.3) definierte Gradient der Wellenfunktion nun in die irreduziblen Anteile von C_{3v} zerlegt werden:

$$\begin{aligned}
 & \left(\vec{n}_1 \cdot \vec{\nabla} \psi_m^k(\vec{X}_1^{(1)}), \vec{n}_2 \cdot \vec{\nabla} \psi_m^k(\vec{X}_2^{(2)}), \vec{n}_3 \cdot \vec{\nabla} \psi_m^k(\vec{X}_3^{(3)}) \right) \\
 &= \sum_{m'=-\infty}^{\infty} \left(B_{mm'}^1 e^{im'\varphi_1}, B_{mm'}^2 e^{im'\varphi_3}, B_{mm'}^3 e^{im'\varphi_3} \right) \\
 &= \underbrace{\sum_{m'=0}^{\infty} A_{mm'} \left(\cos(m'\varphi_1), \cos(m'\varphi_3), \cos(m'\varphi_3) \right)}_{\text{Repräsentation von A1}} \\
 &+ \underbrace{\sum_{m'=1}^{\infty} B_{mm'} \left(\sin(m'\varphi_1), \sin(m'\varphi_3), \sin(m'\varphi_3) \right)}_{\text{Repräsentation von A2}} \\
 &+ \underbrace{\sum_{m'=-\infty}^{\infty} C_{mm'} \left(e^{im'\varphi_1}, \epsilon^2 e^{im'\varphi_3}, \epsilon e^{im'\varphi_3} \right)}_{\text{Repräsentation von E}} \\
 &+ \underbrace{\sum_{m'=-\infty}^{\infty} D_{mm'} \left(e^{-im'\varphi_1}, \epsilon e^{-im'\varphi_3}, \epsilon^2 e^{-im'\varphi_3} \right)}_{\text{Repräsentation von E}}
 \end{aligned} \tag{2.4.2}$$

Mit der Abkürzung $\epsilon = \exp(i2\pi/3)$.

Das Resultat dieser Aufspaltung ist die Zerlegung der M -Matrix in vier Teilmatrizen, eine für jede irreduzible Darstellung der Symmetriegruppe. Jede dieser Matrizen erfüllt die Matrixrelation $\tilde{B}^j \odot \tilde{M}^{jj'} = \tilde{C}^{j'}$.

Die Untermatrix $\tilde{M}^{(A_1)}$ der A_1 Darstellung lautet:

$$\begin{aligned}
 \tilde{M}_{mm'}^{(A_1)}(k) &= \delta_{mm'} + d(m)d(m') \frac{J_m(ka)}{H_{m'}^{(1)}(ka)} \left\{ \cos\left(\frac{\pi}{6}(5m - m')\right) H_{m-m'}^{(1)}(kR) \right. \\
 &\quad \left. + (-1)^{m'} \cos\left(\frac{\pi}{6}(5m + m')\right) H_{m+m'}^{(1)}(kR) \right\}
 \end{aligned} \tag{2.4.3}$$

Die sehr ähnliche $\tilde{M}^{(A_2)}$ Untermatrix hat folgende Gestalt:

$$\begin{aligned}
 \tilde{M}_{mm'}^{(A_2)}(k) &= \delta_{mm'} + d(m)d(m') \frac{J_m(ka)}{H_{m'}^{(1)}(ka)} \left\{ \cos\left(\frac{\pi}{6}(5m - m')\right) H_{m-m'}^{(1)}(kR) \right. \\
 &\quad \left. - (-1)^{m'} \cos\left(\frac{\pi}{6}(5m + m')\right) H_{m+m'}^{(1)}(kR) \right\}
 \end{aligned} \tag{2.4.4}$$

Mit $0 \leq m, m' < \infty$ und:

$$d(m) := \begin{cases} \sqrt{2} & \text{für } m > 0 \\ 1 & \text{für } m = 0 \end{cases}$$

Die erste Untermatrix der E -Representation hat die Form:

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{mm'}^{(E)}(k) = & 2 \frac{J_m(ka)}{H_{m'}^{(1)}(ka)} H_{m-m'}^{(1)}(kR) \cos\left(\frac{\pi}{6}(5m - m' + 4)\right) \\ & + \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

Für $-\infty < m, m' < \infty$. Für die E -Representation kann noch eine weitere Matrix abgeleitet werden, deren Determinante aber die gleichen Nullstellen wie die Determinante von (2.4.5) aufweist. Die Resonanzen des Streuproblems entsprechen nach der bisherigen Argumentation den Nullstellen der drei Determinantenfunktionen:

$$\begin{aligned} \det \tilde{M}^{(A_1)}(k) &= 0 \\ \det \tilde{M}^{(A_2)}(k) &= 0 \\ \det \tilde{M}^{(E)}(k) &= 0 \end{aligned}$$

Die Nullstellen der ersten beiden Gleichungen entsprechen einfachen Polen der S -Matrix, die Nullstellen der dritten Gleichung entsprechen doppelten Polstellen der S -Matrix wegen der Dimension 2 der E -Repräsentation.

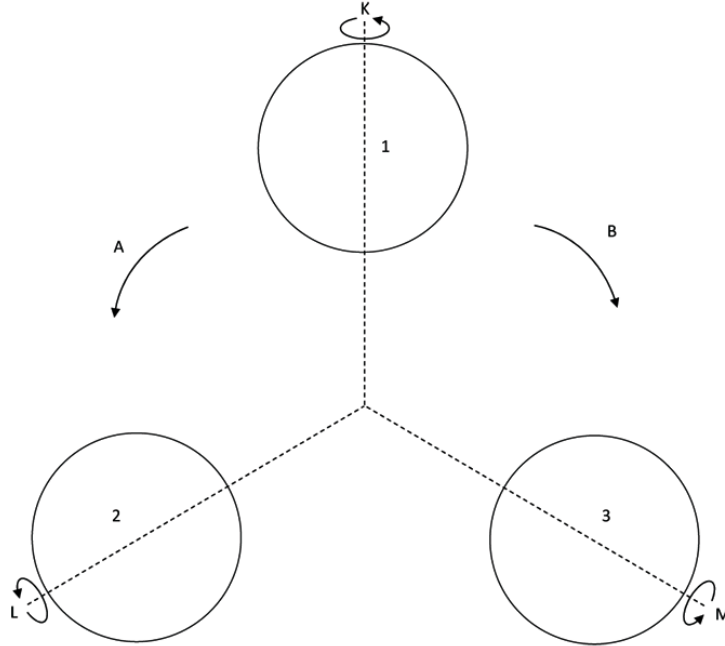


Abbildung 2.2.: Schematische Darstellung der Elemente der C_{3v} -Symmetriegruppe

2.5. Dimensionen

Im klassischen Sinn bezeichnet die Dimension die Anzahl unabhängiger Koordinaten, welche zur vollen Beschreibung aller in einer Menge enthaltenen Punkte notwendig sind. So hat ein einzelner Punkt oder eine Menge disjunkter Punkte die Dimension 0, eine Linie die Dimension 1 und eine Fläche die Dimension 2. Die Existenz von Mengen (z.B. Koch-Kurve, Cantor-Menge), welche sich der klassischen Charakterisierbarkeit hinsichtlich ihrer Dimension entziehen, macht eine Verallgemeinerung des Dimensionsbegriffs notwendig. Diese Erweiterung muss jedoch konsistent zur Definition der klassischen Dimension erfolgen. Es folgt eine kurze Vorstellung des Konzepts der Hausdorff-Dimension.

2.5.1. Hausdorff-Dimension

Der Begriff der Hausdorff-Dimension wurde von Felix Hausdorff eingeführt. Sie bietet die Möglichkeit metrischen Räumen eine Dimension zu zuweisen, wobei die Konsistenz zu den klassisch definierten ganzzahlig dimensionierten Räumen gewahrt bleibt. Die Hausdorff-Dimension leitet sich von der minimalen Anzahl der Sphären ab, welche erforderlich ist, um eine vorgegebene Punktmenge bei festem Sphärenradius ϵ zu überdecken. Wird die Größe der Sphären reduziert, erhöht sich die benötigte Sphärenzahl. Wird nun der Grenzwert dieses Anzahlwertes für unendlich kleine Sphären gebildet, kann aus dem asymptotischen Verhalten der Anzahlfunktion auf die Hausdorff-Dimension geschlossen werden. M sei also eine Menge in einem D dimensionalen Raum. Es bezeichne $N(\epsilon)$ die minimal nötige Anzahl an Sphären mit Radius kleiner ϵ , welche benötigt wird, um M zu überdecken. Die Hausdorff-Dimension D_H ist nun folgendermaßen über das Skalierungsverhalten von $N(\epsilon)$ in Abhängigkeit von ϵ bestimmt:

$$N(\epsilon) \propto \epsilon^{-D_H} \quad \text{für } \epsilon \rightarrow 0 \quad (2.5.1)$$

2.6. Fraktales Weyl-Gesetz

Mit Hilfe der sogenannten Weyl-Formel lässt sich die integrierte Zustandsdichte eines geschlossenen quantenmechanischen Systems berechnen. Diese ist definiert als die Anzahl $N(k)$ der Eigenwerte, deren Wellenzahl \tilde{k}_n kleiner als k sind, im Grenzfall für k gegen unendlich. Für 2-dimensionale Mikrowellen-Billard mit Dirichlet-Randbedingung nimmt die Weyl-Formel folgende Gestalt [10] an:

$$N(k) := \left\{ \tilde{k}_n : \text{Re}(\tilde{k}_n) \leq k \right\} = \frac{A}{4\pi} k^2 - \frac{L}{4\pi} k \quad \text{für } k \rightarrow \infty \quad (2.6.1)$$

A bezeichnet die Fläche und L den Umfang des Billard.

In verallgemeinerter Sicht handelt es sich bei (2.6.1) um die ersten Glieder einer Reihenentwicklung. D.h. höhere Glieder, welche zusätzliche geometrische Eigenschaften berücksichtigen, werden vernachlässigt.

Die komplizierte Verallgemeinerung einer integrierten Resonanzdichte für offene Systeme stellt das sogenannte fraktale Weyl-Gesetz dar. An dieser Stelle sei bemerkt, dass für offene Systeme ohne weitere Annahmen ein nicht hermitescher Hamilton-Operator mit nicht orthogonalen Eigenfunktionen vorliegt. Dies führt zu komplexwertigen Eigenwerten, deren Imaginärteil der Zerfallsrate entspricht:

$$\tilde{k}_n = \text{Re}(\tilde{k}_n) + i \text{Im}(\tilde{k}_n) \quad (2.6.2)$$

Das von Lu, Sridhar und Zworski 2003 postulierte fraktale Weyl-Gesetz (Ref. [5]) verknüpft die integrierte Resonanzdichte mit der Hausdorff-Dimension D_H (siehe 2.1.1) des zugehörigen klassischen Repellers. Hierbei bezeichnet der Repeller die Punkte des Phasenraums, deren Bahnen das System zu keiner Zeit verlassen.

$$N(k) := \left\{ \tilde{k}_n : \text{Im}(\tilde{k}_n) > -C, \text{Re}(\tilde{k}_n) \leq k, C > 0 \right\} \propto k^{1+d_H} \quad \text{für } k \rightarrow \infty \quad (2.6.3)$$

C ist eine Konstante zur Herausfilterung kurzlebiger Zustände

Nach [5] berechnet sich die Hausdorff-Dimension des Repellers zu $D_H = 2d_H + 2$. (2.6.3) stellt wiederum nur den Beginn einer geometrischen Reihe dar.

3. Mikrowellen Experimente

Für die experimentelle Modellierung quantenmechanisch chaotischer Systeme wird die Äquivalenz von Helmholtz- und Schrödinger-Gleichung in zweidimensionalen Kavitäten mit Dirichlet-Randbedingungen genutzt:

$$\begin{aligned} -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) E_z &= k^2 E_z & \text{Randbedingung : } E_z|_{\text{Rand}} = 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \psi_n &= E_n \psi_n & \text{Randbedingung : } \psi_n|_{\text{Rand}} = 0 \end{aligned} \quad (3.0.1)$$

Für $\frac{\hbar^2}{2m} \equiv 1$ entsprechen sich die Wellenfunktion ψ_n und die z -Komponente des \vec{E} -Feldes sowie die Energie E_n und das Quadrat der Wellenzahl k .

Experimente an Mikrowellen-Hohlraumresonatoren können somit zur Untersuchung topologisch äquivalenter quantenchaotischer Systeme dienen. Ein Mikrowellen-Hohlraumresonator kann als zweidimensional aufgefasst werden, wenn sich keine stehende Welle in z -Richtung auszubilden vermag. Die diesbezügliche Grenzfrequenz berechnet sich zu:

$$f_{\text{cutoff}} = \frac{c}{2h}$$

Mit der Höhe h des Resonators und der Lichtgeschwindigkeit c .

3.1. Experimentelle Realisierung des symmetriereduzierten 3-Disc-Systems

Durch eine experimentelle Realisierung der entsprechenden Randbedingungen lässt sich das Resonanzspektrum des vollen 3-Disc-System auf eine der drei irreduziblen Darstellungen der C_{3v} Symmetriegruppe (Abschnitt 2.4.1) beschränken. So können durch die Mikrowellen-Resonatoranordnung, welche in Abb. 3.1 dargestellt ist, Knotenlinien der Wellenfunktionen entlang der metallenen Randbegrenzungen des Billards erzwungen werden. Daraus resultiert bei den entsprechenden Resonanzfrequenzen die Ausbildung einer stehenden Welle, welche, bezogen auf das nichtreduzierte System, einer Realisierung des vollkommen antisymmetrischen Anteils der C_{3v} Gruppe entspricht. Experimentell werden durch den in Abb. 3.1 dargestellten Resonator genau die Nullstellen der $\tilde{M}^{(A_2)}(k)$ -Matrixdeterminantenfunktion (2.4.4) messbar.

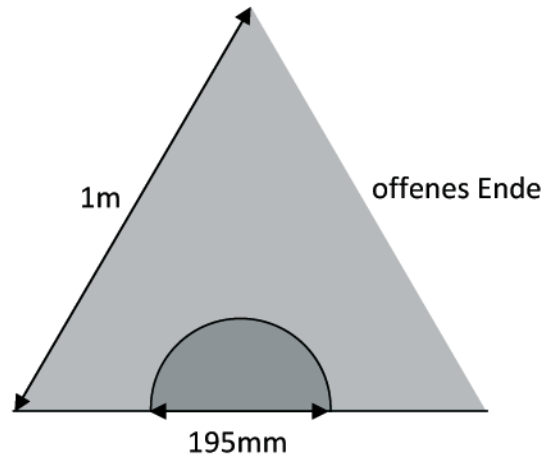


Abbildung 3.1.: Billard des symmetriereduzierten 3-Disc-Systems

Das tatsächlich für das Experiment gebaute Billard (Abb. 3.2, Ref. [8]) hat eine Seitenlänge von 1 m bei einer Höhe von 6 mm. Somit werden Messungen im Frequenzbereich zwischen 1 GHz und 25 GHz möglich. Die halbierte Scheibe wurde mit einem Durchmesser von 195 mm realisiert und verschiebbar gelagert, um problemlos Messungen für verschiedene Disc-Abstand zu Radius Verhältnisse R/a durchführen zu können. Es wurden sehr dicke Deckel- und Bodenplatten aus Aluminium verwendet und das Billard auf einer breiten, ebenen Unterstütsungsfläche gelagert, um die Durchbiegung der Platten zu reduzieren.

Für möglichst kleine Ritzen zwischen Deckelplatte und Seitenteilen bzw. Scheibe und Deckelplatte wurde die Deckelplatte mit je 20 Schrauben mit den Seitenteilen und der Bodenplatte verschraubt. Die offene Seite des gleichseitigen Dreiecks wurde mit einem Mikrowellenabsorber ausgelegt, um Reflexionen am offenen Ende zu unterdrücken. Die Antennen zur Einstahlung und Detektion der Mikrowellen wurden durch Löcher in den Resonator eingeführt. Die Größe der Antennen konnte hierbei im Vergleich zum Scheibendurchmesser und der verwendeten Wellenlänge vernachlässigt werden.

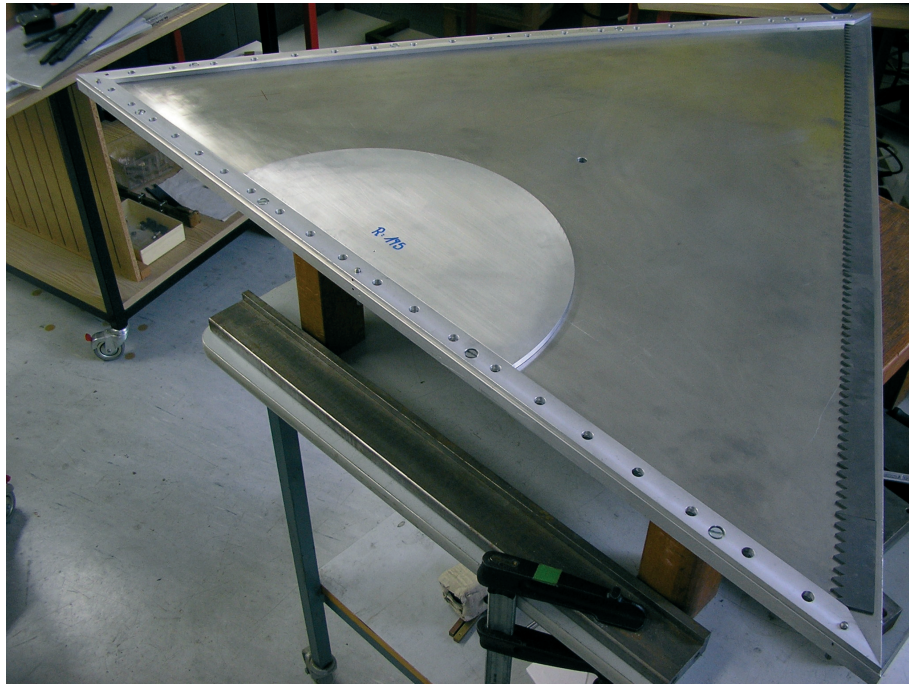


Abbildung 3.2.: Experimenteller Aufbau des symmetriereduzierten Systems, entnommen aus [8]

4. Numerische Berechnungen

4.1. Vorbetrachtungen

Mit Hilfe des programmierten Algorithmus sollten prinzipiell alle Nullstellen der Determinantenfunktionen der in Kapitel 2.4.1 definierten Matrizen gefunden werden können. Wie bereits in Kapitel 2.3 erläutert, sind die entsprechenden Determinantenfunktionen - wie gewünscht - für positive Realteile und negative Imaginärteile des Arguments bis auf abzählbar endlich viele Singularitäten wohldefiniert. Das bedeutet, im betrachteten Bereich ist mit einer endlichen Anzahl von Singularitäten zu rechnen. Diese können leicht programmiertechnisch isoliert und übergangen werden. Ein weiterer Aspekt ist das Konvergenzverhalten der Matrixdeterminanten, welches erst für eine genügende Matrixgröße einsetzt.

Die unendlich dimensionalen Matrizen werden durch quadratische Matrizen innerhalb der Grenzen

$$-\mu \leq m, m' \leq +\mu$$

approximiert. Hierbei muss die Zahl μ hinreichend groß sein, sodass die Matrixelemente außerhalb des quadratischen $\mu \times \mu$ -Ausschnitts sehr klein werden. Dafür wird das Nebendiagonalelement $m = \mu$, $m' = -\mu$ für große Ordnungen der Besselfunktionen approximiert ([2]):

$$\left| \frac{J_\mu(ka)}{H_{-\mu}^{(1)}(ka)} H_{2\mu}^{(1)}(kR) \right| \cong \frac{1}{2(\pi\mu)^{1/2}} \left(\frac{2a}{R} \right)^{2\mu}$$

Dieses Matrixelement ist offensichtlich klein für große μ , wenn die Discs nicht überlappen, d.h.

$$R > 2a$$

Sind die Discs dichter angeordnet, d.h. $R \gtrsim 2a$, muss die Dimensionierung der Matrix offensichtlich wesentlich größer gewählt werden, um Konvergenz zu erreichen.

Weiterhin gilt für das Diagonalelement $m = m' = \mu$:

$$\left| \frac{J_\mu(ka)}{H_\mu^{(1)}(ka)} H_0^{(1)}(kR) \right| \cong \frac{1}{2} \left| H_0^{(1)}(kR) \right| \left(\frac{eka}{2\mu} \right)^{2\mu}$$

Das obige Element wird unter folgender Bedingung genügend klein:

$$\mu > \frac{eka}{2}$$

Diese Bedingung stellt die für alle durchgeführten numerischen Rechnungen zugrundeliegende Konvergenzbedingung dar. Weiterhin wurde die Konvergenz aller Matrixdeterminanten für den Bereich der eingesetzten Argumente ausgiebig getestet. Die Ergebnisse der Konvergenztests sind in Kapitel B.1 dargelegt.

Die Berechnung der komplexwertigen Bessel- und Hankelfunktionen erfolgte unter Ausnutzung der in der *TBCI templated C++ numerical library* ([1]) implementierten Funktionen. Eine Abschätzung der Genauigkeit der verwendeten Funktionen befindet sich im Anhang B.2.

Die Berechnung der Matrixdeterminanten erfolgte mit Hilfe einer stabilisierten LU-Zerlegung, entnommen aus [9].

Für die Nullstellenermittlung wurde der in [9] beschriebene global konvergente Newton-Raphson-Algorithmus mit Line Search und Backtracking verwendet.

Die geforderte Genauigkeit von mindestens 2 Nachkommastellen kann auf Basis der numerischen Vorüberlegungen garantiert werden.

4.2. Struktur des Programmes

Die grundlegende Funktionsweise des Programmes ist in Abb. 4.1 dargestellt. Der so definierte Algorithmus ist in der Lage, den gesamten interessierenden Bereich auf Nullstellen zu überprüfen. Die Auflösbarkeit benachbarter Nullstellen ist hierbei von der einstellbaren Rastergröße *step* abhängig. Eine Rasterung findet nur entlang der reellen Achse statt. Auf Grund des günstigen Funktionsverlaufs, bleibt der Suchalgorithmus bezüglich der reellen Achse sehr stabil. So unterscheiden sich die Realteile der zu einem vorgegebenem Punkt (x, y) gefundenen Nullstellen maximal um den nächsten Nachbarabstand der Resonanzen von x . Hinsichtlich der Imaginärteile kann ebenso der spezielle Funktionsverlauf ausgenutzt werden. So ist der Gradient der Determinantenfunktionen stets so gerichtet, dass der Suchalgorithmus von kleinen Imaginärteilen zu größeren strebt.

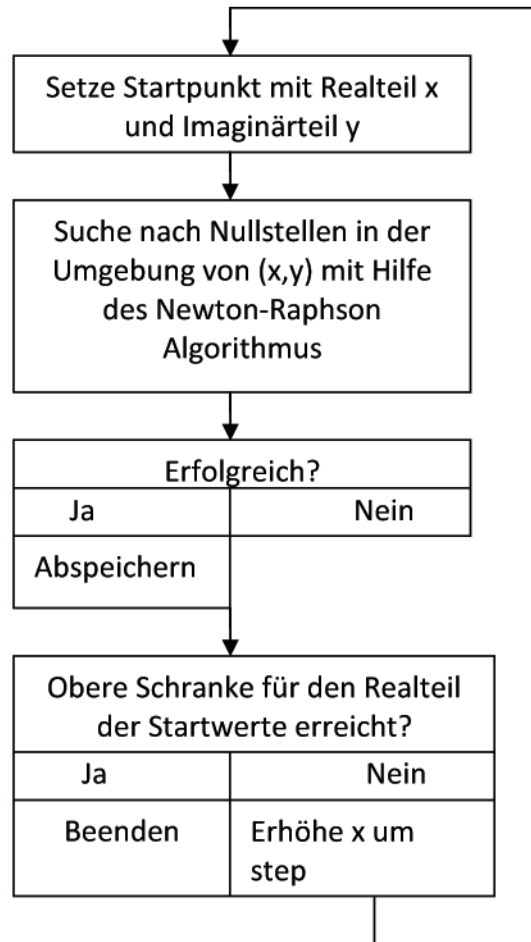


Abbildung 4.1.: Programmablaufskizze

Zum besseren Verständnis wurde exemplarisch eine farblogarithmische Darstellung des reziproken Funktionsverlaufs $1/\det\tilde{M}^{(A_1)}(k)$ im Bereich $8 \leq \operatorname{Re}(ka) \leq 18$ und $-0.5 \leq \operatorname{Im}(ka) \leq 0$ für $R/a = 6.0$ in Abb. 4.2 dargestellt. Unter Ausnutzung dieser Eigenschaften kann auf eine Rasterung entlang der imaginären Achse verzichtet werden. Bezüglich des Imaginärteils werden dem Algorithmus eine obere und eine untere Schranke übergeben. Neben dem Bereich in der komplexen Ebene, welcher auf Nullstellen abgerastert werden soll, können dem Programm auch das Verhältnis zwischen Disc-Abstand und Disc-Radius R/a übergeben werden. Nähere Details zum verwendeten Nullstellensuchverfahren und zur Determinantenberechnung sind [9] zu entnehmen.

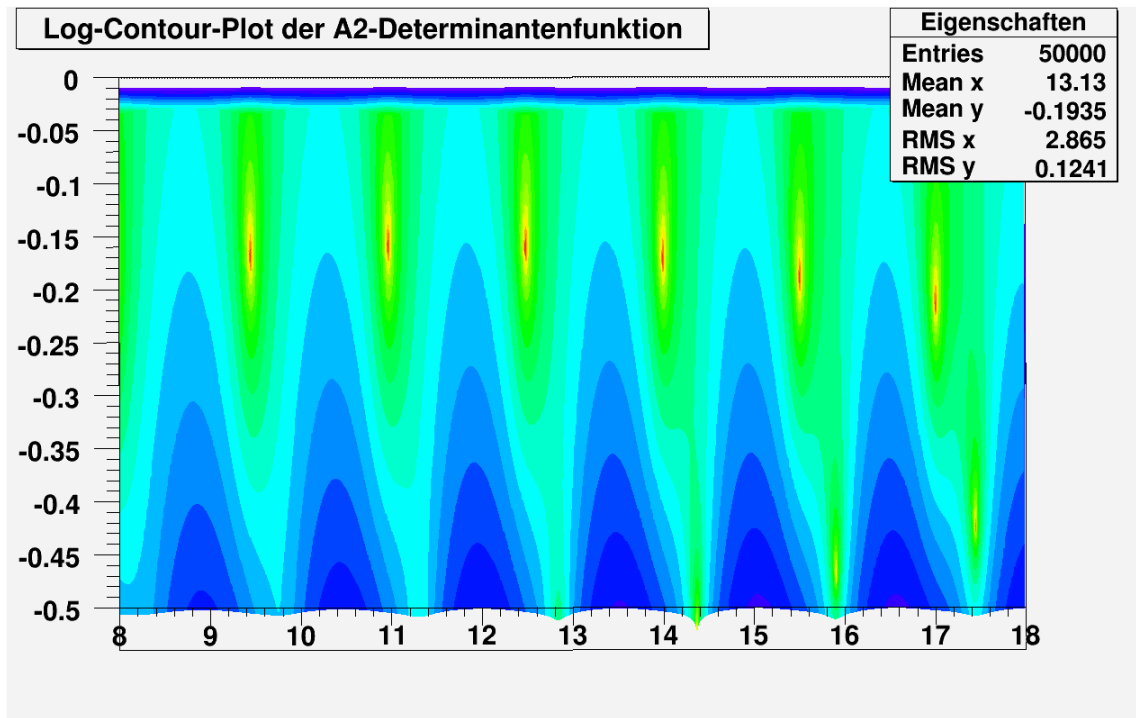


Abbildung 4.2.: farblogarithmischer Contour-Plot der Funktion $1/\det\tilde{M}^{(A_1)}(k)$ im Bereich $8 \leq \operatorname{Re}(ka) \leq 18$ und $-0.5 \leq \operatorname{Im}(ka) \leq 0.0$ für $R/a = 6.0$

Außerdem wurde die Möglichkeit einer graphischen Darstellung der Resonanzen mit Hilfe entsprechender Plot-Objekte der *ROOT Scientific Library* (<http://root.cern.ch/>) implementiert. Durch farblogarithmische Auftragungen der reziproken Determinantenfunktionen (exemplarisch Abb. 4.2) lassen sich zudem fragwürdige Nullstellen verifizieren.

4.3. Ergebnisse

4.3.1. Resonanzen des 3-Disc-Systems

Exemplarisch wurden alle im Bereich $1 \leq \operatorname{Re}(ka) \leq 100$ und $-0.5 \leq \operatorname{Im}(ka) \leq 0.0$ für $R/a = 6.0$ gefundenen Resonanzen der A_1 , A_2 und E -Repräsentation in den Abb. 4.3 bis 4.5 dargestellt. Für alle drei Darstellungen zeigt sich eine bänderartige Verteilung der Resonanzen auf stetig oszillierenden Kurven. Es erfolgt die Ausprägung verbotener Bereiche zwischen den Bändern, innerhalb derer keine Resonanzen auftreten. Weiterhin sind die Resonanzen bezüglich ihres Imaginärteils nach oben beschränkt. Die Resonanzdichten der A_1 und A_2 -Darstellungen sind sich, den Vermutungen entsprechend, sehr ähnlich. Die E -Darstellung zeigt einen deutlich engeren Bandverlauf. Innerhalb des Bandes ist die Resonanzdichte höher im Vergleich zu den A_1 und A_2 -Repräsentationen. Auch die weisen die Oszillationen der Bänder kleinere Abstände auf. Interessant ist der Bereich $60.0 \leq \operatorname{Re}(ka) \leq 70.0$. Hier erfolgt für alle drei Darstellungen eine Verschmelzung der gefundenen Nullstellenverteilungen bezüglich $\operatorname{Im}(ka)$. Das heißt, die gefundenen Resonanzen weisen in diesem Bereich eine vergleichbare Zerfallsrate auf.

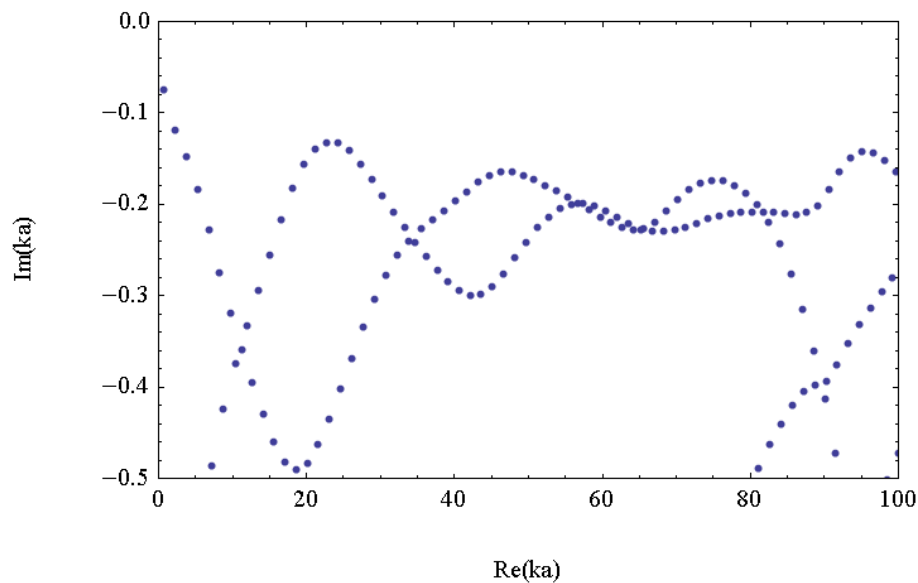


Abbildung 4.3.: Resonanzen der A_1 -Repräsentation im Bereich

$$1 \leq \operatorname{Re}(ka) \leq 100 \text{ und } -0.5 \leq \operatorname{Im}(ka) \leq 0.0 \text{ für } R/a = 6.0$$

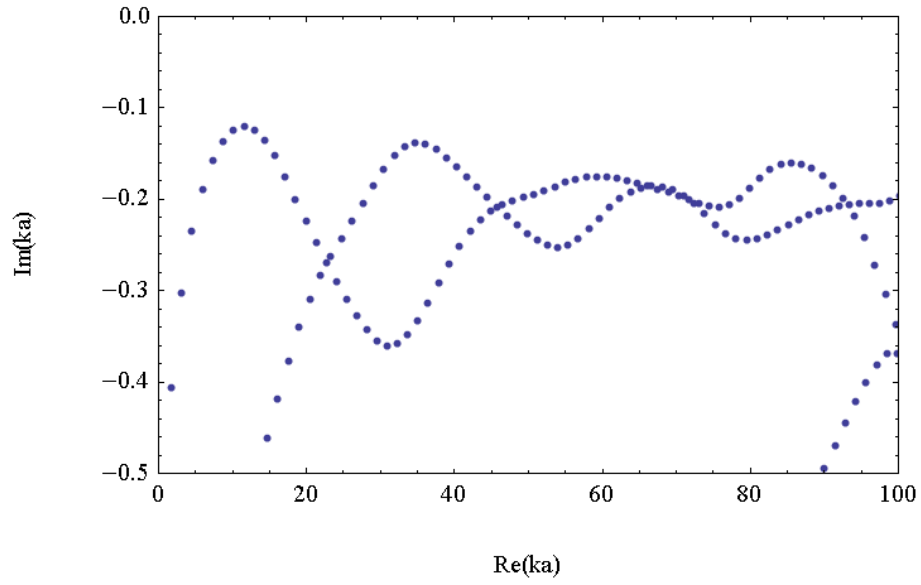


Abbildung 4.4.: Resonanzen der A_2 -Repräsentation im Bereich
 $1 \leq \text{Re}(ka) \leq 100$ und $-0.5 \leq \text{Im}(ka) \leq 0.0$ für $R/a = 6.0$

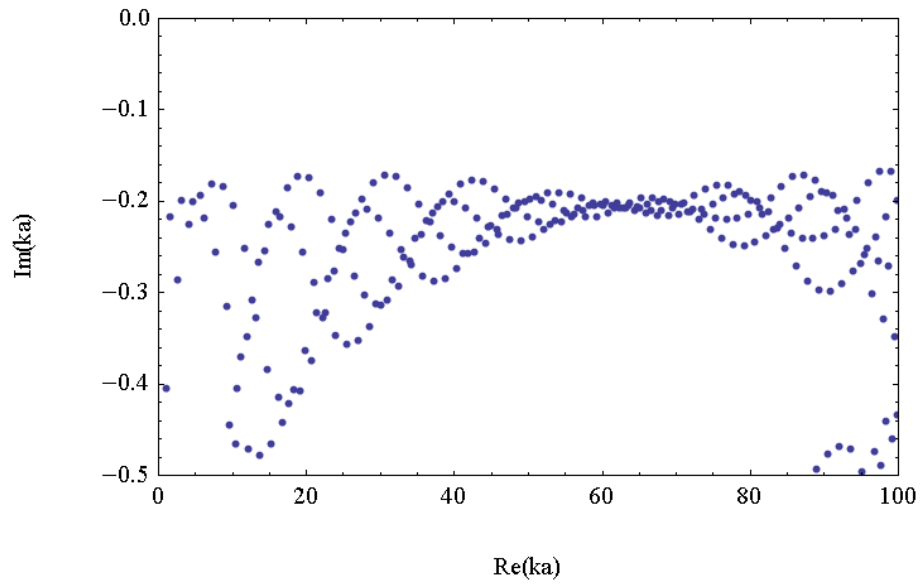


Abbildung 4.5.: Resonanzen der E -Repräsentation im Bereich
 $1 \leq \text{Re}(ka) \leq 100$ und $-0.5 \leq \text{Im}(ka) \leq 0.0$ für $R/a = 6.0$

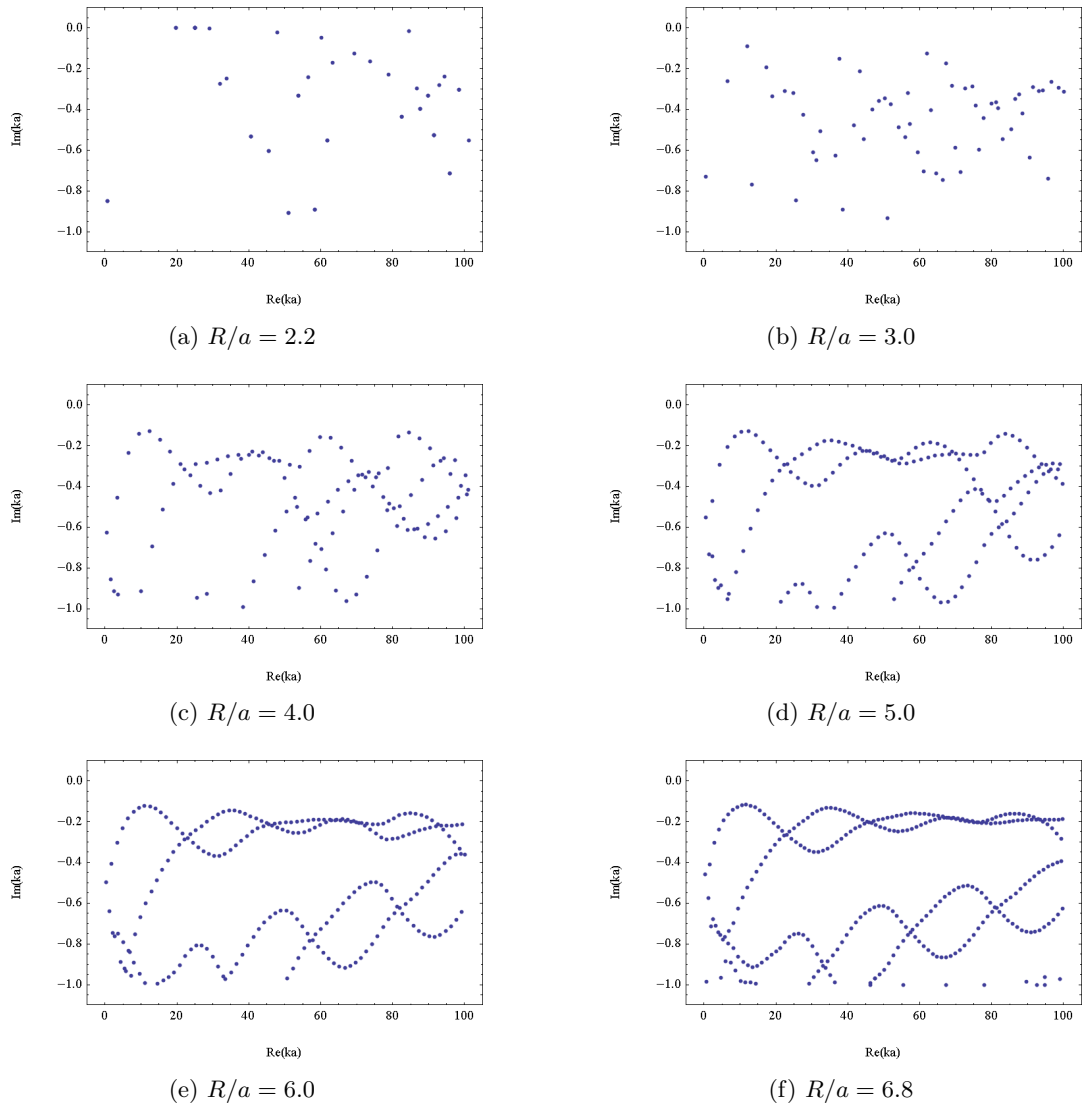


Abbildung 4.6.: Resonanzen der A_2 -Repräsentation im Bereich $1 \leq \text{Re}(ka) \leq 100$ und $-1.0 \leq \text{Im}(ka) \leq 0.0$ für $R/a = 2.2, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0$ und 6.8

Die Veränderung der Resonanzverteilung mit dem Verhältnis R/a wurde in Abb. 4.6 am Beispiel der A_2 -Repräsentation dargestellt. Interessant ist die Herausbildung der Bänderstrukturen für ein ansteigendes Verhältnis R/a aus den für kleinere R/a noch relativ lockeren und schwach geordneten Strukturen. Der erwartete Anstieg der Resonanzdichte mit wachsendem R/a ist ebenfalls deutlich sichtbar. Zudem konnte eine Verschiebung der oberen imaginären Schranke der Resonanzen mit steigendem R/a von Null für $R/a \rightarrow 2.0$, $R/a > 2.0$ (siehe speziell Abb. 4.6 für $R/a = 2.2$) zu kleineren Werten beobachtet werden.

4.3.2. Resonanzen des symmetriereduzierten 3-Disc-Systems

Zur Unterstützung der im Experiment 3.1 ermittelten Resonanzen sollten alle Resonanzen der A_2 -Darstellung im Bereich $1 \leq \text{Re}(ka) \leq 100$ und $-0.5 \leq \text{Im}(ka) \leq 0$ für das Disc-Abstands zu -Radius-Verhältnis $R/a = 6.34$ berechnet werden. Die numerisch ermittelten Resonanzen wurden in Abb. 4.7 den gemessenen Daten grafisch gegenübergestellt.

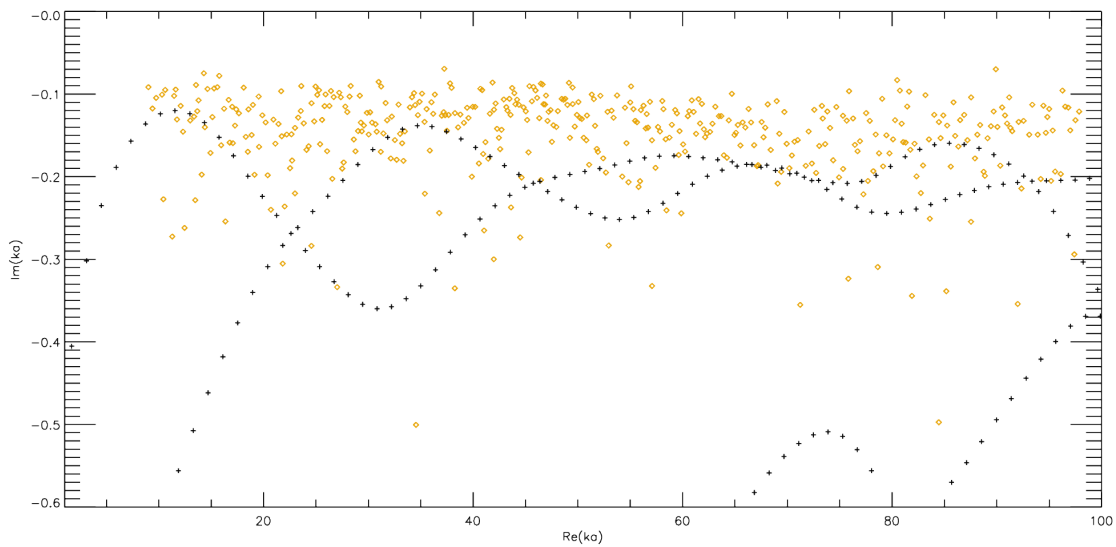


Abbildung 4.7.: Numerisch ermittelte Resonanzen (schwarze Kreuze) sowie gemessene Resonanzen (gelbe Punkte)

Die Gegenüberstellung zeigt deutliche Abweichungen zwischen numerischen und gemessenen Werten. Die Ursache der Abweichungen konnte bislang nicht endgültig geklärt werden. Sicher ist nur, dass systematische Messunzulänglichkeiten zu erheblichen Abweichungen vom idealen symmetriereduzierten 3-Disc-System führen. So könnte eine mangelnde Effektivität des Mikrowellenabsorbers die Randbedingungen des Problems signifikant verändern. Zudem wurde die gesamte Rechnung für die Faktoren 6.32 und 6.36 wiederholt, um Abweichungen von der tatsächlichen Geometrie des Systems zu simulieren und die Auswirkungen derselben auf das Experiment zu untersuchen. In Abb. 4.8 wurde die Auswirkung dieser Variation am Beispiel der $\det \tilde{M}^{(A_2)}(ka)$ -Funktion für den Bereich $9 \leq \text{Re}(ka) \leq 16$ sowie $-0.6 \leq \text{Im}(ka) \leq 0.0$ dargestellt.

Es zeigt sich, dass Variationen des Faktors in einer Größenordnung von 0.02 im Imaginärteil nur geringe Schwankungen in der dritten Nachkommastelle verursachen. Im Realteil zeigen sich jedoch größere Abweichungen, welche bereits in der 1. Nachkommastelle sichtbar werden. Insgesamt folgt aus der Untersuchung, dass die Struktur der Resonanzverteilung und auch die Lage durch eine solch geringe Faktorvariation kaum beeinträchtigt werden. Die dem experimentellen System intrinsischen mechanischen Imperfektionen können daher nicht zur Erklärung der Abweichungen herangezogen werden.

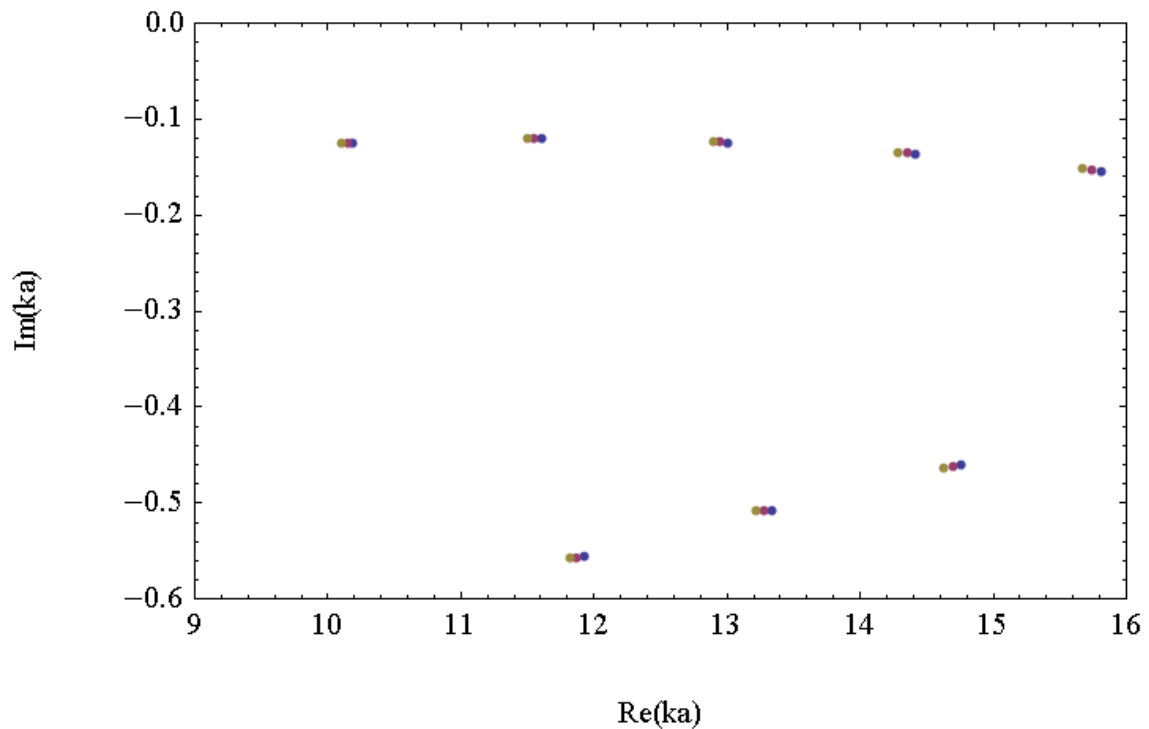


Abbildung 4.8.: Variation des Abstands-Radius-Verhältnisses, die Positionen der Resonanzen zu den Faktoren 6.32 (gelb) und 6.36 (rot) weichen nur wenig von denen des Faktors 6.34 (blau) ab

4.3.3. Hausdorff-Dimension des 3-Disc-Repellers

Zur Überprüfung der Gültigkeit des fraktalen Weyl-Gesetzes für den 3-Disc-Repellers für niedrige Wellenzahlen k wird das asymptotische Verhalten der integrierten Zustandsdichte gemäß den Vorhersagen des fraktalen Weyl-Gesetzes (Abschnitt 2.6) untersucht. Die integrierte Zustandsdichte $N(k)$ folgt aus der Abzählung der Resonanzen im Bereich $0 \leq \operatorname{Re}(k') \leq k$ und $-C \leq \operatorname{Im}(k') \leq 0$. Das Konvergenzverhalten der integrierten Zustandsdichte $N(k)$ lässt sich demnach bei festem k in Abhängigkeit von C untersuchen. Aus dem asymptotischen Verhalten von $N(k) \propto k^{d_H+1}$ in Abhängigkeit von k folgt dann gemäß (2.6.3) die Hausdorff-Dimension $D_H = 2d_h + 2$ des fraktalen Repellers. Nach [5] ist die Dimension des fraktalen Repellers bereits in jeder der drei irreduziblen Symmetrie-Darstellungen (Kapitel 2.4.1) des 3-Disc-Systems enthalten. Es reicht also, die integrierte Zustandsdichte einer der drei Darstellungen zu untersuchen. Für die Vergleichbarkeit mit Experiment (siehe Kapitel 3.1) wurde die Anzahl der Resonanzen der A_2 -Darstellung untersucht.

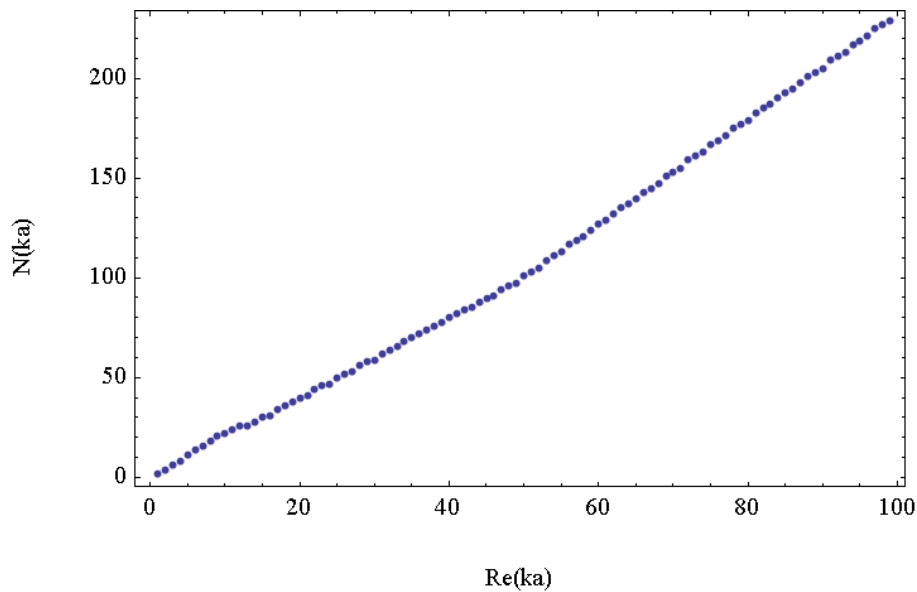


Abbildung 4.9.: Integrierte Zustandsdichte der A_2 -Darstellung für $R/a = 6.0$

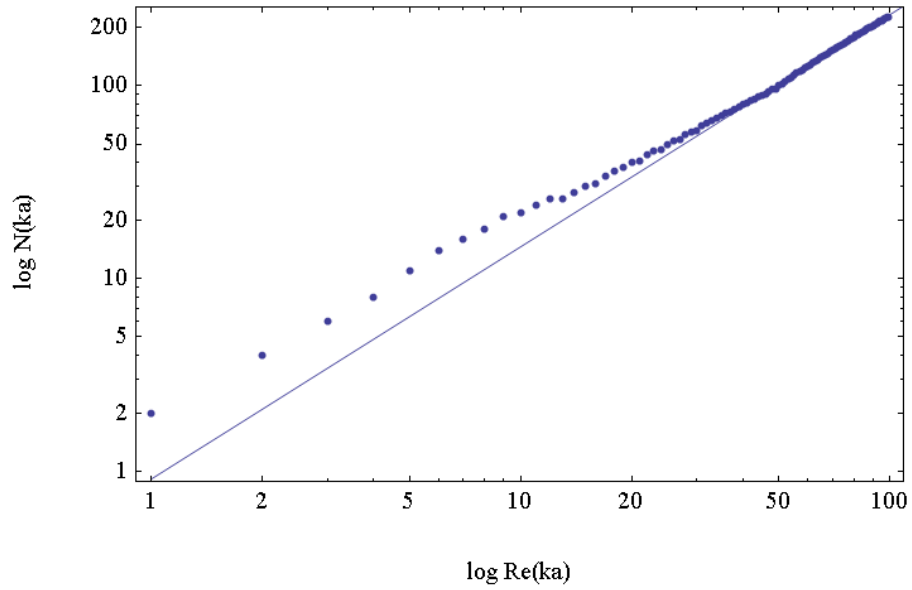


Abbildung 4.10.: Doppeltlogarithmische Auftragung der integrierten Zustandsdichte der A_2 -Darstellung für $R/a = 6.0$ sowie gefitteter Verlauf

Exemplarisch wurde die integrierte Zustandsdichte in Abb. 4.9 und doppeltlogarithmisch in Abb. 4.10 für $R/a = 6.0$ aufgetragen. In Abb. 4.10 wurde zudem eine angefittete Gerade eingezeichnet. Der Fit wurde für alle R/a erst im Bereich $50 < Re(ka) < 100$ gestartet, um den Einfluss von Schwankungen, welche für kleine $Re(ka)$ auftraten, gering zu halten. Ursache dieser Schwankungen ist die stoßweise Zunahme der integrierten Zustandsdichte mit zunehmendem $Re(ka)$ bei festem C , wegen der oszillierenden Bänderstruktur.

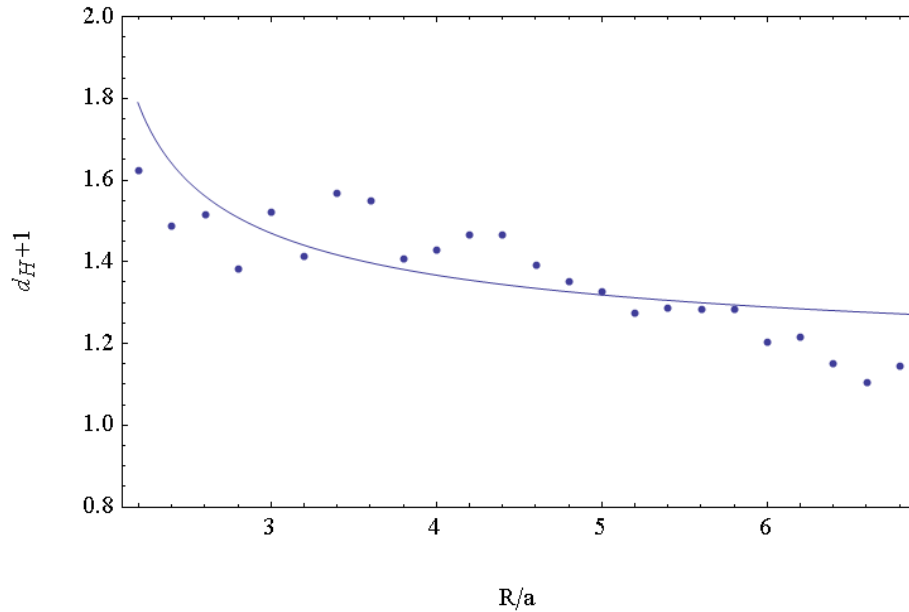


Abbildung 4.11.: Exponent $d_H + 1$ des asymptotischen Verhaltens der Zustandsdichte in Abhängigkeit des Disc-Abstand zu -Radius-Verhältnisses R/a der A_2 -Repräsentation

Die Exponenten $d_H + 1$ wurden in 0.2-Schritten zwischen den Disc-Abstands zu -Radius-Verhältnissen $R/a = 2.2$ und 6.8 jeweils für $0 \leq C \leq 1.0$ und den Bereich $0.5 \leq Re(ka) \leq 100$ ermittelt. Abb. 4.11 zeigt das Verhalten von $d_H + 1$ in Abhängigkeit von R/a für $C = 1.0$ sowie den theoretischen Verlauf des Exponenten entsprechend Ref. [8].

Im Vergleich mit den theoretischen Werten in [8] ergeben sich prinzipielle Übereinstimmungen bezüglich der ermittelten Größenordnung von $d_H + 1$ und der Abnahme von d_H bei zunehmenden R/a . Dennoch zeigen die berechneten Exponenten deutliche Abweichungen von den Werten in [8]. So unterbieten die ermittelten Werte die theoretische Kurve im Bereich $2.2 \leq R/a \leq 3.0$ und $5.2 \leq R/a \leq 6.8$. Hingegen liegen die ermittelten Werte im Bereich $3.0 \leq R/a \leq 5.0$ über den theoretischen. Als Ursache hierfür konnte der zu geringe Abschneidebereich von $Re(ka) \leq 100$ isoliert werden. Die numerischen Rechnungen in [5] zeigen eine größere Übereinstimmung mit den theoretischen Werten in [8]. Die Rechnungen in [5] wurden jedoch in semiklassischer Näherung bis $Re(ka) \leq 1800$ durchgeführt. Die Erschließung ebenso großer Wellenzahl-Bereiche war auf Grund der hohen Konvergenzanforderungen an die exakte quantenmechanische Rechnung mit dem, im Rahmen dieser Arbeit programmierten Algorithmus nicht möglich.

Abb. 4.12 zeigt beispielhaft das Verhalten des Exponenten $d_H + 1$ bei Vergrößerung der Abschneidekonstante C bis zum Maximalwert $C = 1.0$ für $R/a = 4.0, 5.0$ und $6.0, 6.8$.

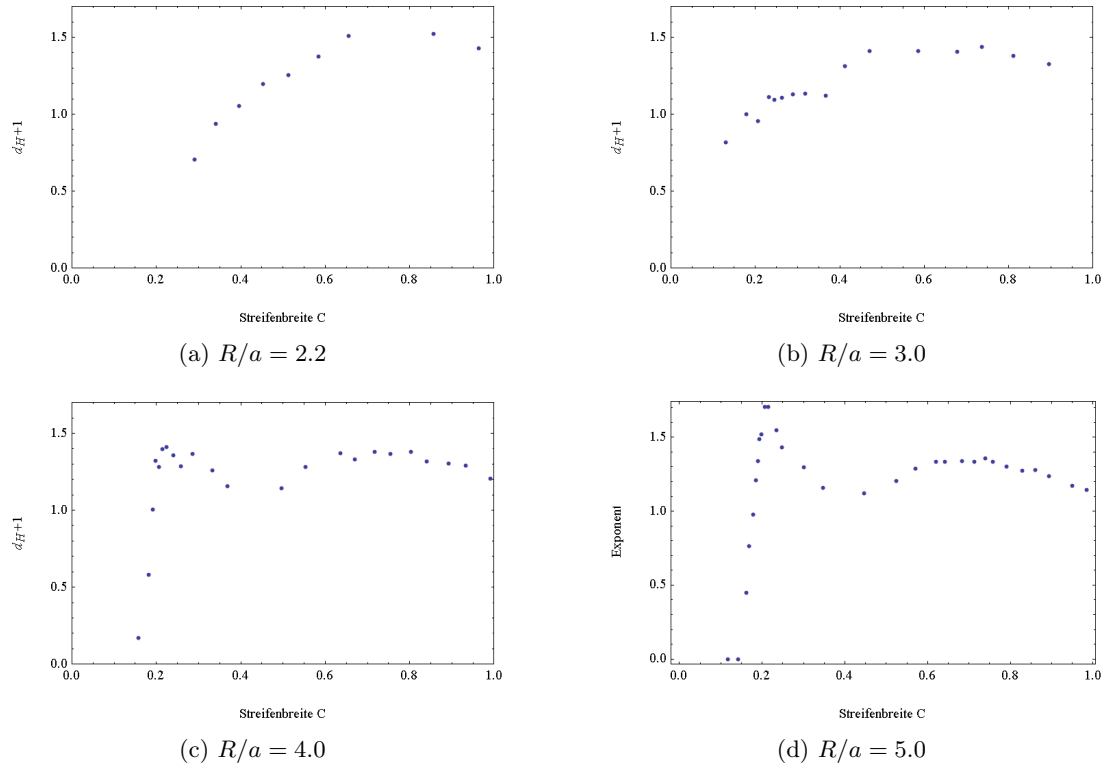


Abbildung 4.12.: Exponent $d_H + 1$ in Abhängigkeit von C für $R/a = 4.0, 5.0, 6.0$ und 6.8

Es zeigt sich zunächst eine sprunghafte Zunahme des Exponenten $d_H + 1$ sobald C die in 4.3.1 erwähnte Grenze der Nullstellenverteilung überschreitet. Bei weiterhin anwachsendem C wird der Anstieg von $d_H + 1$ flacher, eine Tendenz zur Konvergenz lässt sich erahnen. Aus Abb. 4.12 ist zu erkennen, dass $d_H + 1$ in Abhängigkeit von C keine genügende Konvergenz zeigt. Für $R/a = 6.0$ lässt sich vielmehr ein Pendeln des Exponenten $d_H + 1$ erkennen, wobei der Gleichgewichtspunkt auf Grund zu weniger Datenpunkte nicht sicher abgeschätzt werden kann. Genau dies ist der entscheidende Unterschied zu den Ergebnissen in [5]. Durch die Abdeckung des deutlich größeren Bereiches $Re(ka) \leq 1800$ kann die Konvergenz des Exponenten in [5] gut gewährleistet werden. Eine Vergrößerung von $Re(ka)$ führt demnach zu einer Glättung des Kurvenverlaufes von $d_H + 1$ in Abhängigkeit von C .

Den Grund für die Abweichung der berechneten Werte von [5] stellt der zu kleine Abzählbereich dar. Auch die systematisch kleineren Werte von d_H , welche in [8] gemessen wurden, lassen sich somit erklären.

Es besteht kein Widerspruch zwischen den numerischen Ergebnissen und dem fraktalen Weyl-Gesetz (2.6.3), welches theoriegemäß erst für genügend große Wellenzahlen k sinnvolle Ergebnisse liefert.

A. Herleitung der S -Matrixdeterminante

A.1. Grundlagen

Es folgt die Herleitung der Streumatrix für die Streuung eines quantenmechanischen Partikels an einem raumfesten n -Disc-System. Die Herleitung orientiert sich an den Rechnungen in [4] und [11]. Folgende Konventionen wurden für globale und lokale Vektoren gewählt:

- \vec{a}_j Vektor definiert im globalen Koordinatensystem bzgl. Disc j
- $\vec{a}_j^{(j')}$ Vektor im lokalen Koordinatensystem von Disc j' bzgl. Disc j

Alle auftretenden Winkel werden anhand zugehöriger Skizzen definiert.

Wegen der Zeitunabhängigkeit des Streupotentials kann die gesamte Rechnung in stationärer Form erfolgen. Für die Konstruktion der Streuwelle bietet sich eine Entwicklung in die Drehimpulseigenbasis an. Sei $\psi_m^k(\vec{r})$ eine Lösung des Streuproblems für einen beliebigen aber festen Wellenzahl k und eine ebenso beliebige aber feste Drehimpulsquantenzahl m . $\psi_m^k(\vec{r})$ löst die stationäre Schrödingergleichung des Randwertproblems für \vec{r} außerhalb der Discs:

$$(\Delta_r - k^2) \psi_m^k(\vec{r}) = 0 \quad (\text{A.1.1})$$

Für \vec{r} auf den Disc-Oberflächen gilt:

$$\psi_m^k(\vec{r}) = 0 \quad (\text{A.1.2})$$

Gleichung (A.1.1) wird von ebenen Wellen $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ gelöst, eine Entwicklung in die Drehimpulsbasis ergibt hier:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr \cos \phi_r} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(kr) e^{im\phi_r} e^{im(\frac{\pi}{2}-\phi_k)} \quad (\text{A.1.3})$$

Nach der Zerlegung der Besselfunktionen $J_l(z) = \frac{1}{2} \left(H_l^{(1)}(z) + H_l^{(2)}(z) \right)$ in Hankelfunktionen kann von der Näherung für Hankelfunktionen großer Argumente (aus [2]) Gebrauch gemacht werden.

So gilt für große $\|z\| \gg 1$:

$$H_l^{(2)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{-i(z - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} \quad (\text{A.1.4})$$

$$H_l^{(1)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{+i(z - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} \quad (\text{A.1.5})$$

Dementsprechend folgt unter Verwendung der in Kapitel 2.2 hergeleiteten Zerlegung für die Entwicklung der Streuwelle:

$$\psi_m^k(\vec{r}) \propto \frac{1}{\sqrt{2\pi kr}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\delta_{ml} e^{-i(kr - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} + S_{ml} e^{i(kr - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} \right] e^{il\varphi_r} \quad (\text{A.1.6})$$

Hierbei repräsentiert S_{ml} ein Element der Streumatrix $S = 1 - iT(k)$.

A.2. Berechnung der Greenfunktion

Es folgt die Berechnung der Greenfunktion des zweidimensionalen Problems.

Der zweidimensionale Laplace-Operator kann folgendermaßen dargestellt werden:

$$\Delta(r, \varphi) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Die zugehörige Greenfunktion löst nach Voraussetzung folgendes Problem:

$$(\Delta(r, \varphi) - k^2) G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{A.2.1})$$

Die Differentialgleichung (A.2.1) kann durch eine Fouriertransformation in zwei Koordinaten in eine algebraische Gleichung umgewandelt werden. Hierfür wird zunächst die Greenfunktion transformiert:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{2\pi} \int d^2q e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} G(\vec{q}) \quad (\text{A.2.2})$$

Die Fouriertransformierte der zweidimensionalen δ -Funktion lautet:

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2q e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \quad (\text{A.2.3})$$

Das Einsetzen von (A.2.2) und (A.2.3) in (A.2.1) ergibt:

$$\int d^2q e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} [2\pi G(\vec{q})(k^2 - m) - 1] = 0$$

Mit der Abkürzung $m = \frac{\Delta(r, \varphi) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}} = -q^2$

Daraus folgt:

$$G(\vec{q}) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{k^2 - q^2}$$

Und die Greenfunktion in Ortsdarstellung ergibt sich nach Rücktransformation:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2q \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{k^2 - q^2}$$

Die Durchführung der Winkelintegration (ebene Polarkoordinaten) bringt folgendes Ergebnis:

$$\int_{-\pi}^{\pi} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r} - \vec{r}' | \cos \varphi} d\varphi = 2\pi J_0(q|\vec{r} - \vec{r}'|)$$

$J_0(q|\vec{r} - \vec{r}'|)$ ist die Besselfunktion 1. Ordnung.

Das Integral kann somit weiter ausgeführt werden:

$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dq \frac{q}{k^2 - q^2} J_0(q|\vec{r} - \vec{r}'|) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dq \frac{q}{k^2 - q^2} \left(H_0^{(1)}(q|\vec{r} - \vec{r}'|) + H_0^{(1)}(q|\vec{r} - \vec{r}'|) \right) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dq \frac{q}{k^2 - q^2} H_0^{(1)}(q|\vec{r} - \vec{r}'|) \\ &\quad + \frac{1}{4\pi} \int_0^{-\infty} (-dq) \frac{(-q)}{k^2 - q^2} H_0^{(2)}(-q|\vec{r} - \vec{r}'|) \\ &\stackrel{(*)}{=} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dq \frac{q}{k^2 - q^2} H_0^{(1)}(q|\vec{r} - \vec{r}'|) \\ &\quad + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^0 dq \frac{q}{k^2 - q^2} H_0^{(1)}(q|\vec{r} - \vec{r}'|) \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{q}{(q - k)(q + k)} H_0^{(1)}(q|\vec{r} - \vec{r}'|) \end{aligned}$$

Im Schritt (*) wurde die Beziehung $H_n^{(2)}(z e^{i\pi}) = -e^{-in\pi} H_n^{(1)}(z)$ aus [2] verwendet. Das vorliegende Integral wird mit Hilfe des Residuensatzes ausgeführt.

Wegen des asymptotischen Verhaltens der $H_0^{(1)}(q|\vec{r} - \vec{r}'|)$ - Funktion (A.1.5), wird ein Integrationsweg in der oberen Halbebene gewählt, das Verschwinden des Integralbeitrags ist hier gesichert. Unter Annahme eines kleinen Imaginärteils ϵ (anschließend wird der Grenzwert $\epsilon \rightarrow 0$ gebildet) von k ergeben sich 4 verschiedene Möglichkeiten die Pole bei $+k \pm i\epsilon$ und $-k \pm i\epsilon$ zu umlaufen.

- Fall 1 - keine Pole im Integrationsbereich:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = 0$$

- Fall 2 - Pol bei $-k$ im Integrationsbereich:

$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}') &= -\frac{2\pi i}{4\pi} \left(\frac{-k}{2k} \right) H_0^{(1)}(-k|\vec{r} - \vec{r}'|) \\ &= \frac{i}{4} H_0^{(1)}(-k|\vec{r} - \vec{r}'|) \end{aligned}$$

- Fall 3 - Pol bei $+k$ im Integrationsbereich:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\vec{r} - \vec{r}'|)$$

- Fall 4 - beide Pole im Integrationsbereich:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{i}{4} \left(H_0^{(1)}(k|\vec{r} - \vec{r}'|) - H_0^{(1)}(-k|\vec{r} - \vec{r}'|) \right)$$

Nur Fall 3 ist physikalisch relevant, da durch diese Lösung eine auslaufende Welle beschrieben wird:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\vec{r} - \vec{r}'|) \tag{A.2.4}$$

A.3. Berechnung der $\psi_m^k(\vec{r})$

Für die Berechnung der $\psi_m^k(\vec{r})$ wird die Greensche-Integrationsformel verwendet:

$$\begin{aligned} & \int_V dV (\phi(\vec{r}) \Delta_{\vec{r}} \chi(\vec{r}) - \chi(\vec{r}) \Delta_{\vec{r}} \phi(\vec{r})) \\ &= \int_{S(V)} d\vec{S} \cdot \left(\phi(\vec{S}) \vec{\nabla}_{\vec{S}} \chi(\vec{S}) - \chi(\vec{S}) \vec{\nabla}_{\vec{S}} \phi(\vec{S}) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.3.1})$$

\vec{S} bezeichnet hierbei einen zur Oberfläche $S(V)$ von V senkrechten Vektor.

Für die entsprechenden Felder werden nun die vorbereiteten Größen eingesetzt: $\phi(\vec{r}) = \psi_m^k(\vec{r})$ und $\chi(\vec{r}) = G(\vec{r} - \vec{r}')$. Das Volumenintegral in (A.3.1) kann bezüglich der beiden denkbaren Fälle vereinfacht werden.

- Fall 1 $\vec{r}' \notin V$, mit A.1.1 und A.2.1 folgt:

$$\begin{aligned} & \delta(\vec{r} - \vec{r}') = 0 \\ & \Rightarrow \Delta G(\vec{r} - \vec{r}') = k^2 G(\vec{r} - \vec{r}') \\ & \Rightarrow \Delta \psi_m^k(\vec{r}) = k^2 \psi_m^k(\vec{r}) \\ & \Rightarrow \int_V dV \left(\psi_m^k(\vec{r}) \Delta_{\vec{r}} G(\vec{r} - \vec{r}') - G(\vec{r} - \vec{r}') \Delta_{\vec{r}} \psi_m^k(\vec{r}) \right) = 0 \end{aligned}$$

- Fall 2 $\vec{r}' \in V$:

$$\begin{aligned} & \int_V dV \left(\psi_m^k(\vec{r}) \Delta_{\vec{r}} G(\vec{r} - \vec{r}') - G(\vec{r} - \vec{r}') \Delta_{\vec{r}} \psi_m^k(\vec{r}) \right) \\ &= \int_V dV \left(\psi_m^k(\vec{r}) (\delta(\vec{r} - \vec{r}') - k^2 G(\vec{r} - \vec{r}')) + k^2 G(\vec{r} - \vec{r}') \psi_m^k(\vec{r}) \right) \\ &= \int_V dV \psi_m^k(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \psi_m^k(\vec{r}') \end{aligned}$$

Insgesamt folgt also:

$$\begin{aligned} & \int_{S(V)} d\vec{S} \cdot \left(\psi_m^k(\vec{S}) \vec{\nabla}_{\vec{S}} G(\vec{S}, \vec{r}') - G(\vec{S}, \vec{r}') \vec{\nabla}_{\vec{S}} \psi_m^k(\vec{S}) \right) \\ &= \begin{cases} 0 & \vec{r}' \notin V \\ \psi_m^k(\vec{r}') & \vec{r}' \in V \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.3.2})$$

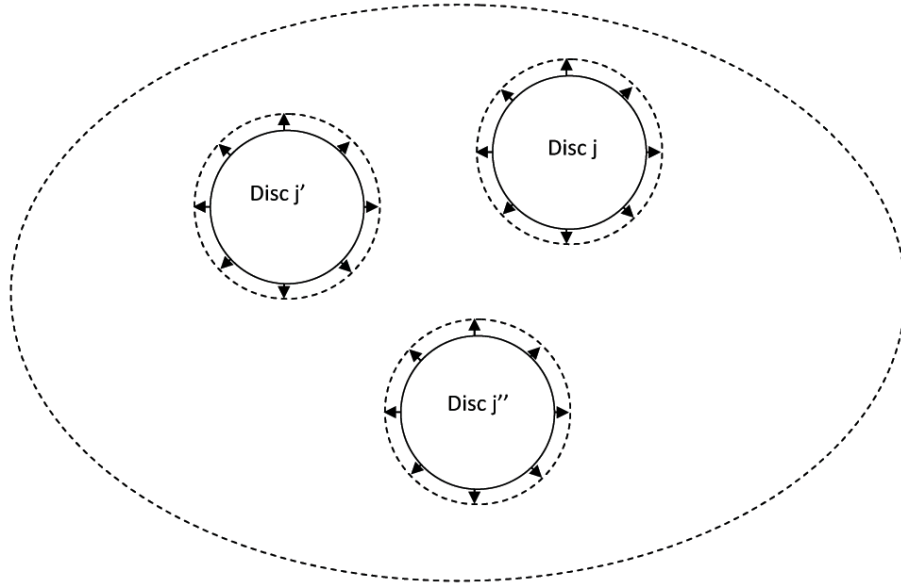


Abbildung A.1.: Infinitesimale Verschiebung des Integrationsbereiches (gestrichelt)

Das Integrationsvolumen V wird so groß gewählt, dass der asymptotische Ansatz für die Hankelfunktionen verwendet werden darf. Alle Discs werden durch eine infinitesimale Verschiebung des Randgebietes von V aus dem Integrationsgebiet genommen (Abb. A.1). Zur Ermittlung der Streumatrix S wird das obige Oberflächenintegral ausgeführt, wobei zwischen den beiden folgenden Fällen zu unterscheiden ist.

- Fall 1: $\vec{r}' \in$ Oberfläche einer Disc j , also außerhalb von V
- Fall 2: $\vec{r}' \in V$

Die Oberfläche von V besteht insgesamt aus $n + 1$ disjunkten Teilen, den n Discoberflächen $\partial_j V$ und dem äußeren Rand $\partial_\infty V$ des Integrationsvolumens V .

Fall 1 $\vec{r}' \in \text{Oberfläche einer Disc } j$

Zuerst wird Fall 1 betrachtet: $\vec{r}' = \vec{X}_j \in \text{Rand von Disc } j$

Wegen der Dirichlet-Randbedingung verschwindet ψ_m^k auf dem Rand der Disc, aber die Ableitung der Wellenfunktion verschwindet nicht. Es gilt:

$$\begin{aligned} \psi_m^k(\vec{X}_j) &= 0, \quad \vec{n}_j \cdot \vec{\nabla} \psi_m^k(\vec{X}_j^{(j)}) = \sum_{m'=-\infty}^{\infty} B_{mm'}^j e^{im'\varphi_j} \\ \vec{X}_j &\in \partial_j V, \quad \vec{n}_j \perp \partial_j V \end{aligned} \quad (\text{A.3.3})$$

Wobei $\vec{X}_j^{(j)}$ im lokalen Koordinatensystem von Disc j abgetragen wird.

Mit den Notationen $|\vec{X}_j^{(j)}| = a_j$ Radius von Disc j , φ_j lokaler Winkel von $\vec{X}_j^{(j)}$ bzgl. Disc j . Der Gradient wurde in A.3.3 in eine Fourierentwicklung mit den unbestimmten Fourier-Koeffizienten $B_{mm'}^j$ zerlegt.

Aus (A.3.2) wird:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{S(V)} d\vec{S} \cdot \left(\psi_m^k(\vec{S}) \vec{\nabla}_{\vec{S}} G(\vec{S}, \vec{r}') - G(\vec{S}, \vec{r}') \vec{\nabla}_{\vec{S}} \psi_m^k(\vec{S}) \right) \\ &= \underbrace{\int_{\partial_{\infty} V} d\vec{s} \cdot \left(\psi_m^k(\vec{s}) \vec{\nabla}_{\vec{s}} G(\vec{s}, \vec{X}_j) - G(\vec{s}, \vec{X}_j) \vec{\nabla}_{\vec{s}} \psi_m^k(\vec{s}) \right)}_{\text{Integration über die Oberfläche von V}} \\ &\quad + \underbrace{\sum_{j'=1}^n \int_{\partial_{j'} V} d\vec{s}_{j'} \cdot \left(0 - G(\vec{s}_{j'}, \vec{X}_j^{(j')}) \vec{\nabla}_{\vec{s}_{j'}} \psi_m^k(\vec{s}_{j'}) \right)}_{\text{Integration über die einzelnen Discoberflächen}} \\ &= I_{\infty}^j + \sum_{j'=1}^n I_{j'}^{j'} \end{aligned} \quad (\text{A.3.4})$$

Für die Umformung dieses Ausdruckes wird das Additionstheorem für Bessel- und Hankelfunktionen (aus [2]) unabdingbar sein:

$$C_n(w) e^{\pm i n \beta} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} C_{n+l}(u) J_l(v) e^{\pm i l \alpha} \quad (\text{A.3.5})$$

Die gilt unter den Voraussetzungen:

$$\begin{aligned} w &= \sqrt{u^2 + v^2 - 2uv \cos \alpha}, \quad w \cos \beta = u - v \cos \alpha \\ |v e^{i\alpha}| &< |u|, \quad w \sin \beta = v \sin \alpha \quad \text{und} \quad C_n(z) \in \left\{ J_n(z), Y_n(z), H_n^{(1)}(z), H_n^{(2)}(z) \right\} \end{aligned}$$

Berechnung von I_∞^j

Zuerst wird die Integration von I_∞^j durchgeführt. Dafür wird erst einmal die Greensche Funktion mit Hilfe des Additionstheorems umgeschrieben:

$$G(\vec{s}, \vec{X}_j) = \frac{1}{4i} H_0^{(1)}(k|\vec{s} - \vec{X}_j|) = \frac{1}{4i} \sum_{m'=-\infty}^{\infty} H_{m'}^{(1)}(ks) J_{m'}(kX_j) e^{im'(\varphi_{X_j} - \varphi_s)} \quad (\text{A.3.6})$$

X_j ist der Betrag von \vec{X}_j , S ist der Betrag von \vec{s} , φ_j ist der Winkel von \vec{X}_j bzgl. des Koordinatenursprungs und φ_s der Winkel von \vec{s} bzgl. des Koordinatenursprungs. Die Vektoren \vec{X}_j und \vec{s} sind in Abb. A.2 dargestellt.

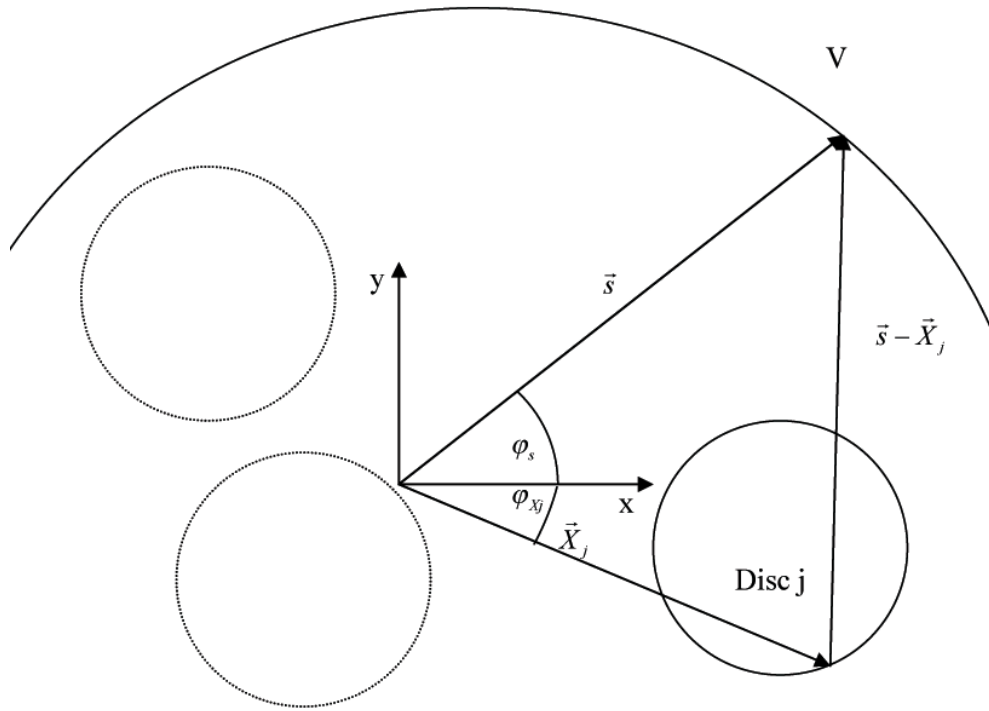


Abbildung A.2.: Skizze des Integrationsbereiches

Die Greensche Funktion nimmt für große Argumente folgende Gestalt an (unter Ausnutzung von A.1.5):

$$G(\vec{s}, \vec{X}_j) \approx \frac{1}{4i} \sqrt{\frac{2}{\pi k s}} \sum_{m'=-\infty}^{\infty} e^{i(k s - m' \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} J_{m'}(k X_j) e^{i m'(\varphi_{X_j} - \varphi_s)} \quad (\text{A.3.7})$$

Es folgt eine weitere Approximation für die Ableitung der Greenfunktion für große Abstände:

$$\partial_s G(\vec{s}, \vec{X}_j) \approx i k G(\vec{s}, \vec{X}_j) \quad (\text{A.3.8})$$

Das Einsetzen der Randpunkte in die approximierten Wellenfunktion (A.1.6) ergibt:

$$\psi_m^k(\vec{s}) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi k s}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\delta_{ml} e^{-i(k s - \frac{\pi}{2} l - \frac{\pi}{4})} + S_{ml} e^{i(k s - \frac{\pi}{2} l - \frac{\pi}{4})} \right] e^{i l \varphi_s} \quad (\text{A.3.9})$$

Unter Verwendung der approximierten Wellenfunktion lässt sich die Ableitung der Wellenfunktion für große Argumente approximieren:

$$\begin{aligned} \partial_s \psi_m^k(\vec{s}) &\approx \frac{i k}{\sqrt{2\pi k s}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[-\delta_{ml} e^{-i(k s - \frac{\pi}{2} l - \frac{\pi}{4})} + S_{ml} e^{i(k s - \frac{\pi}{2} l - \frac{\pi}{4})} \right] e^{i l \varphi_s} \\ &\quad + O(s^{-\frac{3}{2}}) \end{aligned} \quad (\text{A.3.10})$$

Die Ausdrücke (A.3.7), (A.3.8), (A.3.9) und (A.3.10) können nun weiterverwendet werden:

$$\begin{aligned} &\left(\psi_m^k(\vec{s}) \vec{\nabla}_{\vec{s}} G(\vec{s}, \vec{X}_j) - G(\vec{s}, \vec{X}_j) \vec{\nabla}_{\vec{s}} \psi_m^k(\vec{s}) \right) \\ &= \frac{1}{2\pi s} \sum_{m', l=-\infty}^{\infty} e^{i(k s - m' \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} e^{i m'(\varphi_{X_j} - \varphi_s)} e^{-i(k s - l \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} e^{i l \varphi_s} J_{m'}(k X_j) \delta_{ml} \end{aligned}$$

Dies lässt sich direkt in I_∞^j einsetzen:

$$\begin{aligned} I_\infty^j &= \sum_{m', l=-\infty}^{\infty} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi_s e^{-im'\varphi_s} e^{il\varphi_s}}_{2\pi\delta_{m'l}} s \frac{1}{2\pi s} e^{-im'\frac{\pi}{2}} e^{il\frac{\pi}{2}} e^{im'\varphi_{X_j}} J_{m'}(kX_j) \delta_{ml} \\ &= J_m(kX_j) e^{im\varphi_{X_j}} \end{aligned}$$

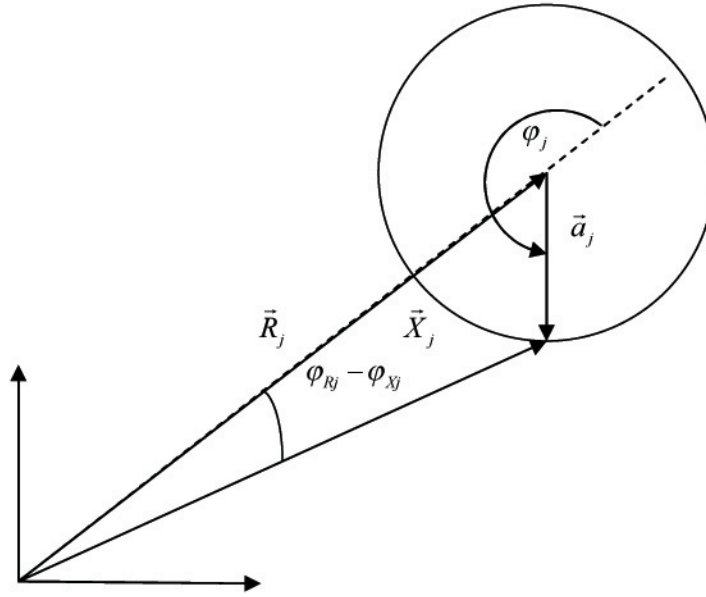


Abbildung A.3.: Skizze der Vektoren \vec{X}_j , \vec{R}_j , \vec{a}_j und Winkel φ_{X_j} , φ_{R_j} sowie φ_j

Eine weitere Anwendung des Additionstheorems (A.3.5) ergibt:

$$\begin{aligned} I_\infty^j &= J_m(kX_j) e^{im\varphi_{X_j}} = e^{im\varphi_{R_j}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_{m+l}(kR_j) J_l(ka_j) e^{-il(\varphi_j - \pi)} \\ &= e^{im\varphi_{R_j}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_{m-l}(kR_j) J_l(ka_j) e^{il\varphi_j} \end{aligned} \quad (\text{A.3.11})$$

Wobei im letzten Schritt Property 20 von [6] verwendet wurde. Alle auftretenden Vektorbeträge und Winkel sind in Abb. A.3 dargestellt.

Berechnung der $I_j^{j'}$

Nun folgt die Berechnung der $I_j^{j'}$. Hierbei wird zuerst das spezielle Element I_j^j berechnet:

$$I_j^j = - \int_{\partial_j V} d\vec{s}_j \cdot G(\vec{s}_j, \vec{X}_j^{(j)}) \vec{\nabla}_{\vec{s}_j} \psi_m^k(\vec{s}_j)$$

Analog (A.3.3) und (A.3.6) folgt für $G(\vec{s}_j, \vec{X}_j^{(j)})$ und $\vec{\nabla}_{\vec{s}_j} \psi_m^k(\vec{s}_j)$:

$$G(\vec{s}_j, \vec{X}_j^{(j)}) = \frac{1}{4i} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(ks_j) J_l(kX_j^{(j)}) e^{il(\varphi_j - \varphi_{s_j})}$$

$$\vec{\nabla}_{\vec{s}_j} \psi_m^k(\vec{s}_j) = \sum_{m'=-\infty}^{\infty} B_{mm'}^j e^{im'\varphi_{s_j}}$$

φ_j bezeichnet den Winkel des Vektors $\vec{X}_j^{(j)}$, welcher im lokalen Koordinatensystem vom Mittelpunkt der Disc j zum Rand der Disc j zeigt. φ_{s_j} bezeichnet ebenso den Winkel des Randvektors \vec{s}_j im lokalen Koordinatensystem (Abb. A.4). Der Betrag s_j des Vektors \vec{s}_j ist außerdem gleich dem Disc-Radius a_j .

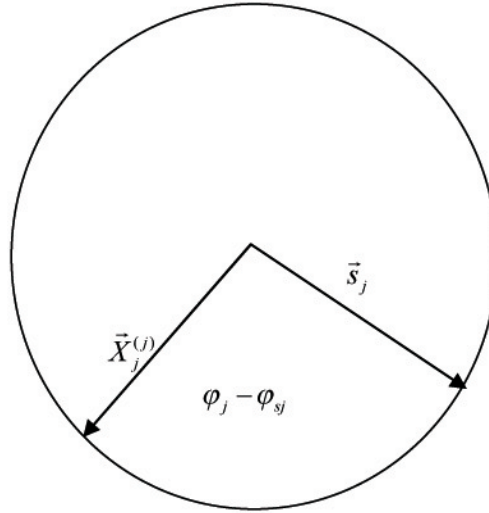


Abbildung A.4.: Skizze der Vektoren $\vec{X}_j^{(j)}$, \vec{s}_j und des Winkels $\varphi_j - \varphi_{s_j}$

Für I_j^j folgt:

$$\begin{aligned}
I_j^j &= - \int_{\partial_j V} d\vec{s}_j \cdot G(\vec{s}_j, \vec{X}_j^{(j)}) \vec{\nabla}_{\vec{s}_j} \psi_m^k(\vec{s}_j) \\
&= - \sum_{l, m'=-\infty}^{\infty} \frac{a_j}{4i} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi_{s_j} e^{-il\varphi_{s_j}} e^{im'\varphi_{s_j}} e^{il\varphi_j}}_{2\pi\delta_{lm'}} B_{mm'}^j H_l^{(1)}(ka_j) J_l(ka_j) \\
&= - \frac{\pi a_j}{2i} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(ka_j) J_l(ka_j) B_{ml}^j e^{il\varphi_j}
\end{aligned} \tag{A.3.12}$$

Nun zur Berechnung der $I_j^{j'}$ für $j' \neq j$:

$$I_j^{j'} = - \int_{\partial_{j'} V} G(\vec{s}_{j'}, \vec{X}_j^{(j')}) \vec{\nabla}_{\vec{s}_{j'}} \psi_m^k(\vec{s}_{j'})$$

Die Green-Funktion kann, wie bereits mehrfach verwendet, folgendermaßen entwickelt werden:

$$G(\vec{s}_{j'}, \vec{X}_j^{(j')}) = \frac{1}{4i} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kX_j^{(j')}) J_l(ka_{j'}) e^{-il(\varphi_{s_{j'}} - \varphi_{jj'})}$$

$\vec{s}_{j'}$, $\vec{X}_j^{(j')}$, $\varphi_{s_{j'}}$ und $\varphi_{jj'}$ werden in Abb. A.5 erläutert.

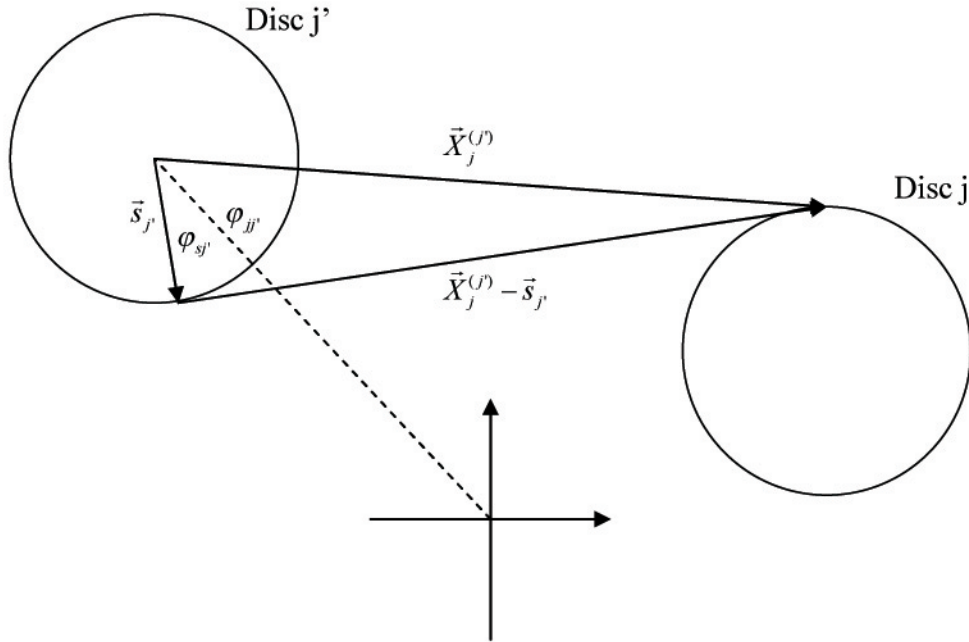


Abbildung A.5.: Skizze der Vektoren $\vec{X}_j^{(j')}$, $\vec{s}_{j'}$, $\vec{X}_j^{(j')} - \vec{s}_{j'}$ und der Winkel $\varphi_{s_{j'}}$ sowie $\varphi_{jj'}$

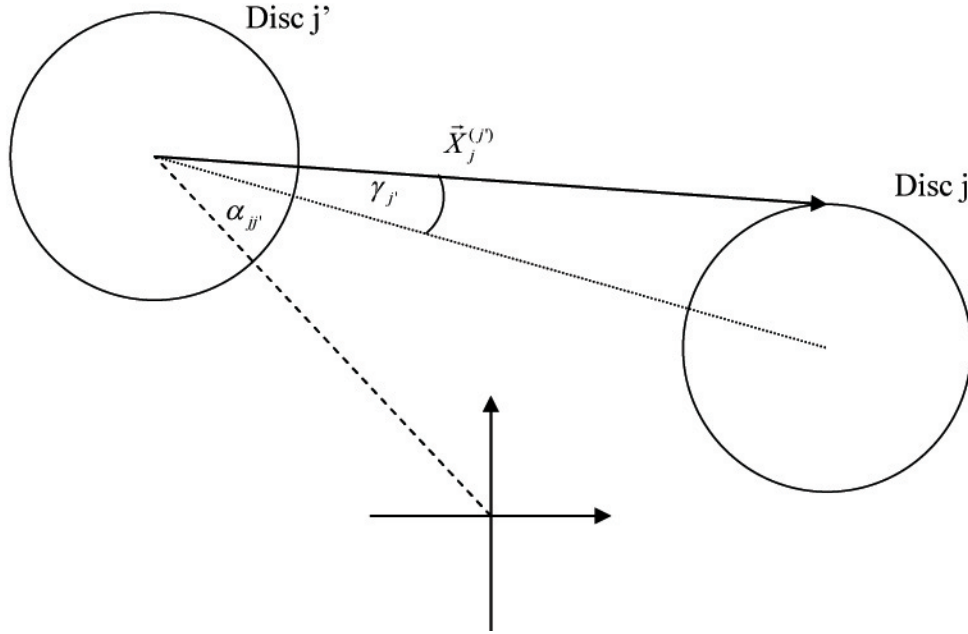


Abbildung A.6.: Skizze der Vektoren $\vec{X}_j^{(j')}$ und der Winkel $\gamma_{j'}$ sowie $\alpha_{jj'}$

Aus den Abbildungen A.5 und A.6 lässt sich folgende Zerlegung des Winkels $\varphi_{jj'}$ ablesen:

$$\varphi_{jj'} = \alpha_{jj'} + \gamma_{j'}$$

Die Greenfunktion und der Gradient der Wellenfunktion haben die Gestalt:

$$G(\vec{s}_{j'}, \vec{X}_j^{(j')}) = \frac{1}{4i} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kX_j^{(j')}) J_l(ka_{j'}) e^{-il(\varphi_{s_{j'}} - (\alpha_{jj'} + \gamma_{j'}))}$$

$$\vec{\nabla}_{\vec{s}_{j'}} \psi_m^k(\vec{s}_{j'}) = \sum_{m'=-\infty}^{\infty} B_{mm'}^{j'} e^{im' \varphi_{s_{j'}}}$$

Nun kann das Integral $I_j^{j'}$ endlich ausgeführt werden:

$$\begin{aligned}
I_j^{j'} &= - \int_{\partial_{j'} V} d\vec{s}_{j'} \cdot G(\vec{s}_{j'}, \vec{X}_j^{(j')}) \vec{\nabla}_{\vec{s}_{j'}} \psi_m^k(\vec{s}_{j'}) \\
&= - \sum_{l, m'=-\infty}^{\infty} \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{-il\varphi_{s_{j'}}} e^{im'\varphi_{s_{j'}}} d\varphi_{s_{j'}}}_{2\pi\delta_{lm'}} a_{j'} \frac{1}{4i} e^{il(\alpha_{jj'} + \gamma_{j'})} \\
&\quad \times H_l^{(1)}(kX_j^{(j')}) J_l(ka_{j'}) B_{mm'}^{j'} \\
&= - \frac{a_{j'}\pi}{2i} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kX_j^{(j')}) J_l(ka_{j'}) B_{ml}^{j'} e^{il(\alpha_{jj'} + \gamma_{j'})}
\end{aligned}$$

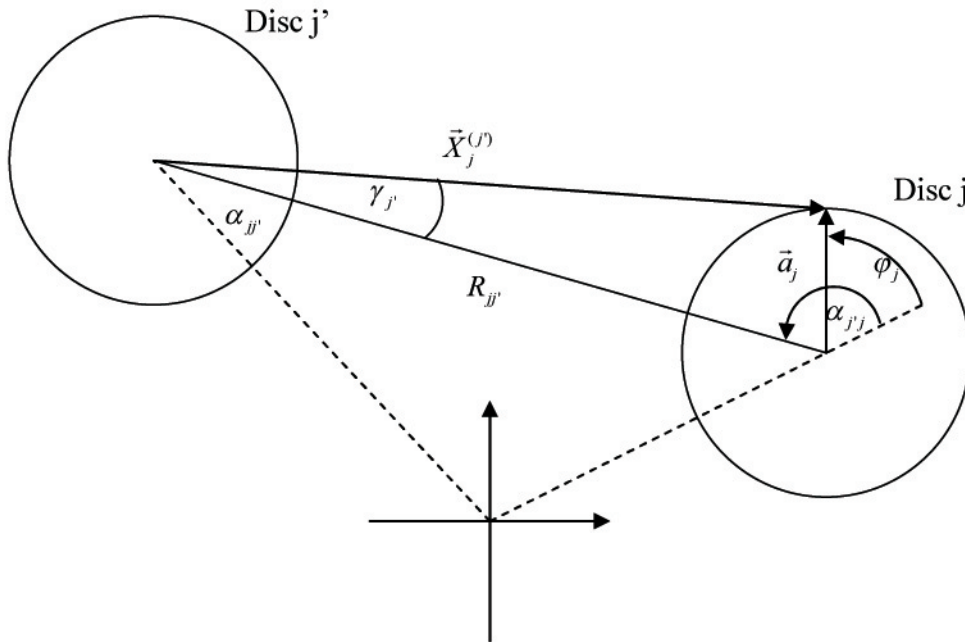


Abbildung A.7.: Skizze der Vektoren $\vec{X}_j^{(j')}$, \vec{a}_j , des Disc-Abstandes $R_{jj'}$ und der Winkel $\gamma_{j'}$, $\alpha_{jj'}$, φ_j sowie $\alpha_{j'j}$

Wiederum folgt mit (A.3.5) und Abb. A.7:

$$\begin{aligned}
H_l^{(1)}(kX_j^{(j')})e^{il\gamma_{j'}} &= \sum_{l'=-\infty}^{\infty} H_{l+l'}(kR_{jj'})J_{l'}(ka_j)e^{il'(\alpha_{j'j}-\varphi_j)} \\
&= \sum_{l'=-\infty}^{\infty} H_{l-l'}^{(1)}(kR_{jj'})J_{l'}(ka_j)e^{-il'(\alpha_{j'j}-\varphi_j)}e^{il'\pi} \\
&= \sum_{l'=-\infty}^{\infty} H_{l-l'}^{(1)}(kR_{jj'})J_{l'}(ka_j)e^{il'(\varphi_j-\alpha_{j'j})}(-1)^{l'}
\end{aligned}$$

Das Integral lautet somit:

$$\begin{aligned}
I_j^{j'} &= -\frac{a_{j'}\pi}{2i} \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} B_{ml}^{j'} J_l(ka_{j'}) H_{l-l'}^{(1)}(kR_{jj'}) J_{l'}(ka_j) \\
&\quad \times (-1)^{l'} e^{il'\varphi_j} e^{i(l\alpha_{jj'}-l'\alpha_{j'j})}
\end{aligned} \tag{A.3.13}$$

Berechnung der C^j - und $M^{jj'}$ -Matrizen

Unter Benutzung von Gleichung (A.3.4) folgt:

$$I_\infty^j = -\sum_{j'=1}^n I_{j'}^j$$

Setzt man nun die Ausdrücke (A.3.11), (A.3.12) und (A.3.13) ein ergibt sich folgende Gleichung:

$$\begin{aligned}
e^{im\varphi_{R_j}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_{m-l}(kR_j) J_l(ka_j) e^{il\varphi_j} &= \frac{\pi a_j}{2i} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(ka_j) J_l(ka_j) B_{ml}^j e^{il\varphi_j} \\
+ \frac{a_{j'}\pi}{2i} \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} B_{ml}^{j'} J_l(ka_{j'}) H_{l-l'}^{(1)}(kR_{jj'}) J_{l'}(ka_j) (-1)^{l'} \\
&\quad \times e^{il'\varphi_j} e^{i(l\alpha_{jj'}-l'\alpha_{j'j})}
\end{aligned} \tag{A.3.14}$$

Die linke Seite wird nun umgeschrieben:

$$e^{im\varphi_{R_j}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_{m-l}(kR_j) J_l(ka_j) e^{il\varphi_j} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{C}_{ml}^j e^{il\varphi_j}$$

Mit der Abkürzung:

$$\hat{C}_{ml}^j = e^{im\varphi_{R_j}} J_{m-l}(kR_j) J_l(ka_j)$$

Ebenso lässt sich auch die rechte Seite umformen:

$$\begin{aligned} & \frac{\pi a_j}{2i} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(ka_j) J_l(ka_j) B_{ml}^j e^{il\varphi_j} + \frac{a_{j'}\pi}{2i} \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} B_{ml}^{j'} J_l(ka_{j'}) H_{l-l'}^{(1)}(kR_{jj'}) \\ & \times J_{l'}(ka_j) (-1)^{l'} e^{il'\varphi_j} e^{i(l\alpha_{jj'}-l'\alpha_{j'j})} = \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} B_{ml}^{j'} \hat{M}_{ll'}^{jj'} e^{il\varphi_j} \end{aligned}$$

Mit den Abkürzungen:

$$\begin{aligned} \hat{M}_{ll'}^{jj'} &= \frac{a_j\pi}{2i} \delta_{jj'} \delta_{ll'} H_l^{(1)}(ka_j) J_l(ka_j) + \frac{a_{j'}\pi}{2i} (1 - \delta_{jj'}) J_{l'}(ka_{j'}) H_{l-l'}^{(1)}(kR_{jj'}) \\ & \times J_l(ka_j) (-1)^l e^{i(l'\alpha_{jj'}-l\alpha_{j'j})} \end{aligned}$$

Nach dem Teilen von \hat{C}_{ml}^j und $\hat{M}_{ll'}^{jj'}$ durch $\frac{a_j\pi}{2i} H_l^{(1)}(ka_j) J_l(ka_j)$ erhält man die Ausdrücke:

$$C_{ml}^j = e^{im\varphi_{R_j}} \frac{2i J_{m-l}(kR_j)}{H_l^{(1)}(ka_j) \pi a_j} \quad (\text{A.3.15})$$

$$\begin{aligned} M_{ll'}^{jj'} &= \frac{a_{j'}}{a_j} (1 - \delta_{jj'}) \frac{J_{l'}(ka_{j'})}{H_l^{(1)}(ka_j)} H_{l-l'}^{(1)}(kR_{jj'}) (-1)^l e^{i(l'\alpha_{jj'}-l\alpha_{j'j})} \\ & + \delta_{jj'} \delta_{ll'} \end{aligned} \quad (\text{A.3.16})$$

Hieraus folgt die komprimierte Matrixschreibweise der Relation (A.3.14):

$$\mathbf{C}^j = \mathbf{B}^{j'} \odot \mathbf{M}^{j'j} \quad (\text{A.3.17})$$

Beziehung ermöglicht die Bestimmung der $B^{j'}$ -Matrix und damit des Gradienten der Wellenfunktion. Die Wellenfunktion ist daher allein durch die Geometrie der Anordnung bis auf eine Konstante bestimmt.

Fall 2 $\vec{r} = \vec{r}' \in V$

Nun zur Behandlung des 2. Falls: $\vec{r} = \vec{r}' \in V$ für große r .

Aus (A.3.2) folgt:

$$\psi_m^k(\vec{r}) = I_\infty^\vec{r} + \sum_{j=1}^n I_j^\vec{r} \quad (\text{A.3.18})$$

Mit den entsprechenden Integralen:

$$I_\infty^\vec{r} = \int_{\partial_\infty V} d\vec{s} \cdot \left(\psi_m^k(\vec{s}) \vec{\nabla}_{\vec{s}} G(\vec{s}, \vec{r}) - G(\vec{s}, \vec{r}) \vec{\nabla}_{\vec{s}} \psi_m^k(\vec{s}) \right) \quad (\text{A.3.19})$$

$$I_j^\vec{r} = - \int_{\partial_j V} d\vec{s}_j G(\vec{s}_j, \vec{r}^{(j)}) \vec{\nabla}_{\vec{s}_j} \psi_m^k(\vec{s}_j) \quad (\text{A.3.20})$$

Berechnung von $I_\infty^\vec{r}$

Wiederum wird die Greensche Funktion verwendet:

$$G(\vec{s}, \vec{r}) = \frac{1}{4i} \sum_{m=-\infty}^{\infty} H_m^{(1)}(ks) J_m(kr) e^{im(\varphi_r - \varphi_s)}$$

Wie bereits für I_∞^j verwendet, kann die Greensche-Funktion folgendermaßen approximiert werden (unter Ausnutzung von A.1.5):

$$G(\vec{s}, \vec{r}) \approx \frac{1}{4i} \sqrt{\frac{2}{\pi ks}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i(ks - m\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} J_m(kr) e^{im(\varphi_r - \varphi_s)}$$

Es folgt eine weitere Approximation für die Ableitung der Greenfunktion für große Abstände:

$$\partial_s G(\vec{s}, \vec{r}) \approx ik G(\vec{s}, \vec{r})$$

Das Einsetzen der Randpunkte in die approximierte Wellenfunktion (A.1.6) ergibt:

$$\psi_m^k(\vec{s}) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi ks}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\delta_{ml} e^{-i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} + S_{ml} e^{i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} \right] e^{il\varphi_s}$$

Unter Verwendung der approximierten Wellenfunktion lässt sich die Ableitung der Wellenfunktion für große Argumente approximieren:

$$\begin{aligned} \partial_s \psi_m^k(\vec{s}) &\approx \frac{ik}{\sqrt{2\pi ks}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[-\delta_{ml} e^{-i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} + S_{ml} e^{i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} \right] e^{il\varphi_s} \\ &\quad + O(s^{-\frac{3}{2}}) \end{aligned}$$

In einer Nebenrechnung lassen sich die wichtigen Terme vereinfachen.

Dafür wird zuerst der Term $\psi_m^k(\vec{s}) \partial_s G(\vec{s}, \vec{r})$ berechnet.

$$\begin{aligned} \psi_m^k(\vec{s}) \partial_s G(\vec{s}, \vec{r}) &= \frac{1}{4i} \frac{i}{\pi s} \sum_{l,m'} \left[\delta_{ml} e^{-i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} + S_{ml} e^{i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} \right] \\ &\quad \times e^{il\varphi_s} e^{i(ks - m\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} J_m(kr) e^{im(\varphi_r - \varphi_s)} \end{aligned}$$

Nun wird der Term $G(\vec{s}, \vec{r}) \partial_s \psi_m^k(\vec{s})$ vereinfacht.

$$\begin{aligned} G(\vec{s}, \vec{r}) \partial_s \psi_m^k(\vec{s}) &= \frac{1}{4i} \frac{i}{\pi s} \sum_{l,m'} \left[-\delta_{ml} e^{-i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} + S_{ml} e^{i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} \right] \\ &\quad \times e^{il\varphi_s} e^{i(ks - m\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} J_m(kr) e^{im(\varphi_r - \varphi_s)} \end{aligned}$$

Die Nebenrechnung wird durch die Berechnung des wichtigen Terms

$\psi_m^k(\vec{s}) \partial_s G(\vec{s}, \vec{r}) - G(\vec{s}, \vec{r}) \partial_s \psi_m^k(\vec{s})$ abgeschlossen:

$$\begin{aligned} &\psi_m^k(\vec{s}) \partial_s G(\vec{s}, \vec{r}) - G(\vec{s}, \vec{r}) \partial_s \psi_m^k(\vec{s}) \\ &= \frac{1}{2\pi s} \sum_{l,m'} \delta_{ml} e^{-i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} e^{il\varphi_s} e^{i(ks - m\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} J_m(kr) e^{im(\varphi_r - \varphi_s)} \end{aligned}$$

Nun kann das Integral $I_\infty^{\vec{r}}$ (A.3.19) leicht ausgeführt werden:

$$\begin{aligned} &\int_0^{2\pi} s \, d\varphi_s \left(\psi_m^k(\vec{s}) \vec{\nabla}_{\vec{s}} G(\vec{s}, \vec{r}) - G(\vec{s}, \vec{r}) \vec{\nabla}_{\vec{s}} \psi_m^k(\vec{s}) \right) \\ &= \sum_{l,m'} \int_0^{2\pi} \underbrace{\frac{1}{2\pi} e^{il\varphi_s} e^{-im'\varphi_s} d\varphi_s}_{\delta_{m'l}} \delta_{ml} e^{-i(ks - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4})} e^{i(ks - m'\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} J_{m'}(kr) e^{im'\varphi_r} \\ &= \sum_l \delta_{ml} J_{m'}(kr) \delta_{m'l} e^{im'\varphi_r} = J_m(kr) e^{im\varphi_r} \end{aligned} \tag{A.3.21}$$

Berechnung von $I_j^{\vec{r}}$

Es schließt sich die Berechnung von $I_j^{\vec{r}}$ an.

Wiederum wird die Greensche Funktion den Gegebenheiten angepasst:

$$G(\vec{s}_j, \vec{r}^{(j)}) = \frac{1}{4i} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kr^{(j)}) J_l(ks_j) e^{-il(\varphi_{s_j} - \varphi_{r^{(j)}})}$$

Eine Erklärung der Größen \vec{s}_j , $\vec{r}^{(j)}$, φ_{s_j} und $\varphi_{r^{(j)}}$ kann in Abb. A.8 gefunden werden.

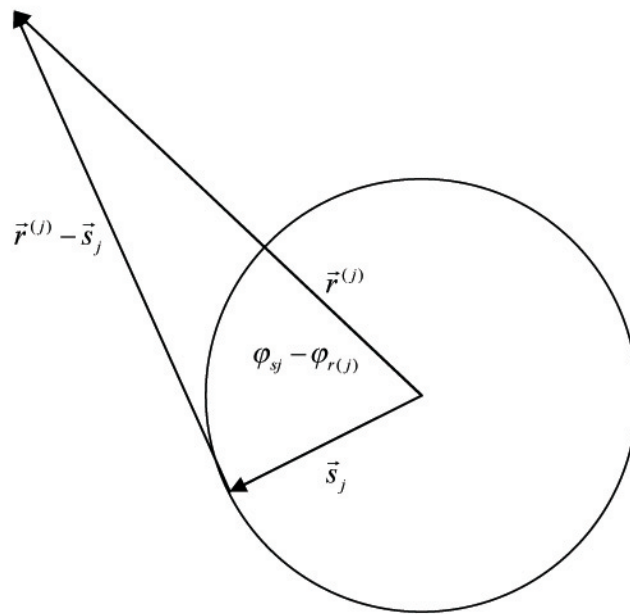


Abbildung A.8.: Skizze der Vektoren $\vec{r}^{(j)}$, \vec{s}_j , $\vec{r}^{(j)} - \vec{s}_j$ und des Winkels $\varphi_{s_j} - \varphi_{r^{(j)}}$

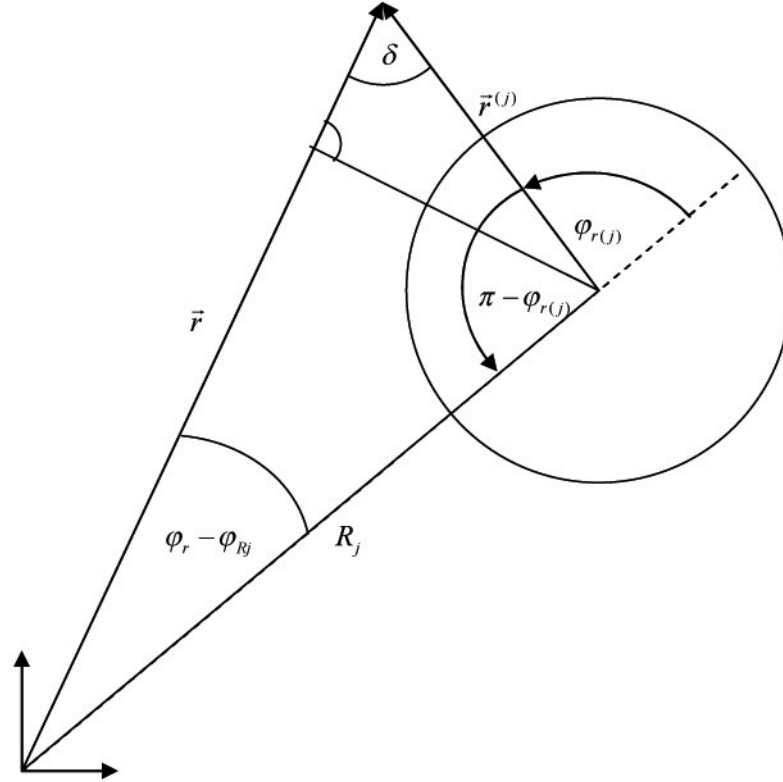


Abbildung A.9.: Skizze der Vektoren \vec{r} , $\vec{r}^{(j)}$, des Betrags R_j und der Winkel $\varphi_r - \varphi_{R_j}$ sowie $\varphi_{r(j)}$

Aus Abb. A.9 geht folgender Zusammenhang für den Winkel δ hervor:

$$\delta = \pi - (\varphi_r - \varphi_{R_j}) - (\pi - \varphi_{r(j)}) = \varphi_{r(j)} + \varphi_{R_j} - \varphi_r$$

Unter Verwendung des Additionstheorems (A.3.5) ergibt sich folgende Umformung:

$$H_l^{(1)}(kr^{(j)}) = \sum_{l'=-\infty}^{\infty} H_{l'+l}^{(1)}(kr) J_{l'}(kR_j) e^{+il'(\varphi_r - \varphi_{R_j})} e^{-il(\varphi_{r(j)} + \varphi_{R_j} - \varphi_r)}$$

Dies kann nun in die Greensche-Funktion eingesetzt werden:

$$\begin{aligned}
G(\vec{s}_j, \vec{r}^{(j)}) &= \frac{1}{4i} \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} H_{l'+l}^{(1)}(kr) J_{l'}(kR_j) e^{+il'(\varphi_r - \varphi_{R_j})} \\
&\quad \times e^{-il(\varphi_{r(j)} + \varphi_{R_j} - \varphi_r)} J_l(ks_j) e^{-il(\varphi_{s_j} - \varphi_{r(j)})} \\
&\stackrel{l+l'=m, s_j=a_j}{=} \sum_{l,m=-\infty}^{\infty} H_m^{(1)}(kr) J_{m-l}(kR_j) J_l(ka_j) e^{-il\varphi_{s_j}} e^{im\varphi_r} e^{-im\varphi_{R_j}}
\end{aligned}$$

Die angepasste Ableitung der Wellenfunktion lautet gemäß (A.3.3):

$$\vec{s}_j \cdot \vec{\nabla} \psi_m^k(\vec{s}_j) = \sum_{m'=-\infty}^{\infty} B_{mm'}^j e^{im'\varphi_{s_j}}$$

Somit ergibt sich der Wert des Integrals (A.3.20) zu:

$$\begin{aligned}
I_j^{\vec{r}} &= -\frac{1}{4i} \sum_{l,l',m'=-\infty}^{\infty} B_{mm'}^j \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{im'\varphi_{s_j}} e^{-il\varphi_{s_j}} d\varphi_{s_j}}_{2\pi\delta_{m'l}} a_j \\
&\quad \times H_{l'+l}^{(1)}(kr) J_{l'}(kR_j) J_l(ka_j) e^{il'(\varphi_r - \varphi_{R_j})} \\
&= -\frac{\pi a_j}{2i} \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} H_{l'+l}^{(1)}(kr) J_{l'}(kR_j) J_l(ka_j) B_{ml}^j e^{il'(\varphi_r - \varphi_{R_j})} \quad (\text{A.3.22})
\end{aligned}$$

Das Einsetzen von (A.3.22) und (A.3.20) in (A.3.18) ergibt die gesuchten $\psi_m^k(\vec{r})$.

A.4. Berechnung der S -Matrix

Durch den Vergleich der beiden Ausdrücke für die Wellenfunktion (A.1.6) und (A.3.18) kann die Gestalt der S -Matrix ermittelt werden.

$$\begin{aligned}
I_{\infty}^{\vec{r}} + \sum_{j=1}^n I_j^{\vec{r}} &= \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\delta_{ml} H_l^{(2)}(kr) + S_{ml} H_l^{(1)}(kr) \right] e^{il\varphi_r} \\
\Leftrightarrow J_m(kr) e^{im\varphi_r} - \frac{\pi a_j}{2i} \sum_{j=1}^n \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kr) J_{l-l'}(kR_j) J_{l'}(ka_j) B_{ml'}^j e^{il(\varphi_r - \varphi_{R_j})} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\delta_{ml} H_l^{(2)}(kr) + S_{ml} H_l^{(1)}(kr) \right] e^{il\varphi_r} \\
\Leftrightarrow \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(H_l^{(1)}(kr) + H_l^{(2)}(kr) \right) e^{im\varphi_r} - \frac{\pi a_j}{2i} \sum_{j=1}^n \sum_{l,l'=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kr) J_{l-l'}(kR_j) \\
&\quad \times J_{l'}(ka_j) B_{ml'}^j e^{il(\varphi_r - \varphi_{R_j})} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\delta_{ml} H_l^{(2)}(kr) + S_{ml} H_l^{(1)}(kr) \right] e^{il\varphi_r} \\
\Rightarrow S_{ml} &= 1 - \frac{\pi a_j}{i} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} J_{l-l'}(kR_j) J_{l'}(ka_j) B_{ml'}^j e^{-il\varphi_{R_j}} \tag{A.4.1}
\end{aligned}$$

Es folgt in Matrixschreibweise:

$$S^{(n)} = 1 - iB^j \odot D^j \tag{A.4.2}$$

Mit der Abkürzung:

$$D_{mm'}^j = -\pi a_j J_{m'-m}(kR_j) J_m(ka_j) e^{-im'\varphi_{R_j}} \tag{A.4.3}$$

Der in (A.3) erhaltene Ausdruck für die Matrix C^j wird nun nach $B^{j'}$ umgestellt. Es wird in Ref. [11] bewiesen, dass $M^{jj'}$ invertierbar ist.

$$B^{j'} = C^j \odot (M^{-1})^{jj'}$$

Es folgt für $S^{(n)}$:

$$S^{(n)} = 1 - iC^j \odot (M^{-1})^{jj'} \odot D^{j'} \tag{A.4.4}$$

A.5. Berechnung von $\det_l S^{(n)}$

Berechnung des Matrixproduktes $D^j \odot C^{j'}$

Für die Berechnung von $\det_l S^{(n)}$ ist nach (2.3.6) die Berechnung des Matrixproduktes $D \odot C$ notwendig. Unter Verwendung von (A.3.15) und (A.4.3) folgt für die Berechnung des Produkts $D^j \odot C^{j'}$ für $j \neq j'$:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} D_{lm}^j C_{ml'}^{j'} = - \sum_{m=-\infty}^{\infty} \pi a_j J_{m-l}(kR_j) J_l(ka_j) e^{-im\varphi_{R_j}} e^{im\varphi_{R_{j'}}} \frac{2i J_{m-l'}(kR_{j'})}{\pi a_{j'} H_{l'}^{(1)}(ka_{j'})}$$

Es folgt eine Nebenrechnung zur Vereinfachung des obigen Terms:

$$\begin{aligned} & \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{m-l}(kR_j) J_{m-l'}(kR_{j'}) e^{-im\varphi_{R_j}} e^{im\varphi_{R_{j'}}} \\ & \stackrel{n=m-l}{=} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(kR_j) J_{n+(l-l')}(kR_{j'}) e^{i(n+l)(\varphi_{R_{j'}} - \varphi_{R_j})} \end{aligned}$$

Unter Ausnutzung des Additionstheorems (A.3.5) folgt weiter:

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(kR_j) J_{n+(l-l')}(kR_{j'}) e^{i(n+l)(\varphi_{R_{j'}} - \varphi_{R_j})} \\ & = J_{l-l'}(kR_{j'}) e^{i(l-l')(\alpha_{jj'} - \pi)} e^{il(\varphi_{R_{j'}} - \varphi_{R_j})} \\ & = J_{l-l'}(kR_{j'}) e^{il((\alpha_{jj'} - \pi) + (\varphi_{R_{j'}} - \varphi_{R_j}))} e^{-il'\alpha_{jj'}} e^{il'\pi} \end{aligned}$$

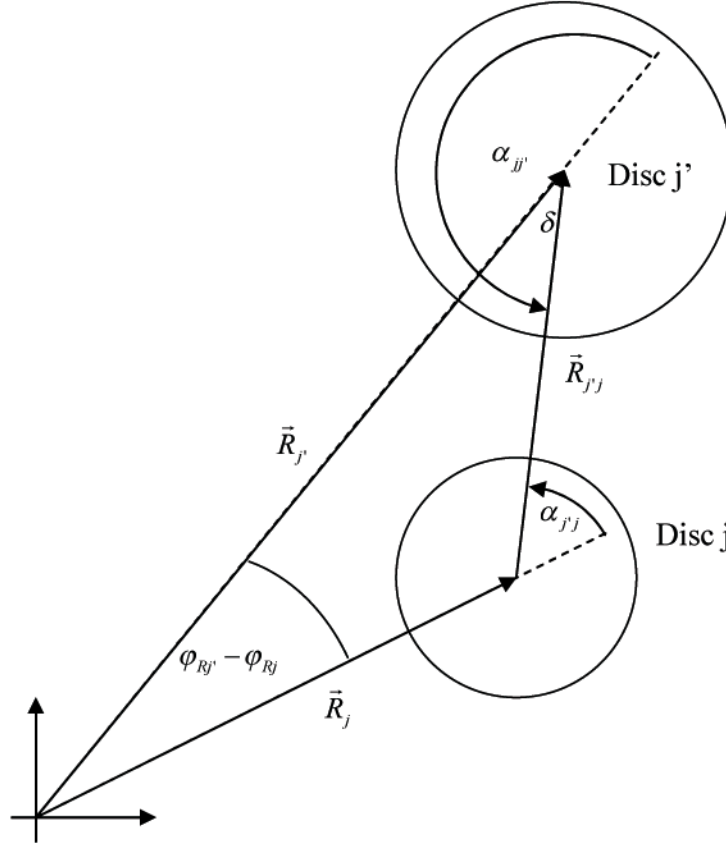


Abbildung A.10.: Skizze der Vektoren \vec{R}_j , $\vec{R}_{j'}$, $\vec{R}_{j'j}$ und Winkel $\varphi_{R_{j'}} - \varphi_{R_j}$, δ , $\alpha_{j'j}$ sowie $\alpha_{jj'}$

Folgende Winkelbeziehung ist nützlich (siehe Abb. A.10):

$$\pi = (\varphi_{R_{j'}} - \varphi_{R_j}) + (\alpha_{jj'} - \pi) + (\pi - \alpha_{j'j}) \Leftrightarrow (\varphi_{R_{j'}} - \varphi_{R_j}) = \pi + \alpha_{j'j} - \alpha_{jj'}$$

Mit Hilfe der Winkelbeziehung lässt sich die Nebenrechnung abschließen:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(kR_j) J_{n+(l-l')}(kR_{j'}) e^{i(n+l)(\varphi_{R_{j'}} - \varphi_{R_j})} = J_{l-l'}(kR_{j'j}) e^{il\alpha_{j'j}} e^{-il'\alpha_{jj'}} (-1)^{l'}$$

Für das Produkt $D^j \odot C^{j'}$ folgt schlussendlich:

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{\infty} D_{lm}^j C_{ml'}^{j'} &= -2i \left(\frac{a_j}{a_{j'}} \right) \frac{J_l(ka_j)}{H_{l'}^{(1)}(ka_{j'})} J_{l-l'}(kR_{jj'}) \\ &\quad \times e^{i(l\alpha_{jj'} - l'\alpha_{jj'})} (-1)^{l'} \end{aligned} \quad (\text{A.5.1})$$

Nun wird noch der spezielle Fall $j = j'$ betrachtet:

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{\infty} D_{lm}^j C_{ml'}^j &= - \sum_{m=-\infty}^{\infty} \pi a_j J_{m-l}(kR_j) J_l(ka_j) e^{-im\varphi_{R_j}} e^{im\varphi_{R_j}} \frac{2iJ_{m-l'}(kR_j)}{\pi a_j H_{l'}^{(1)}(ka_j)} \\ &= - \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{m-l}(kR_j) J_l(ka_j) \frac{2iJ_{m-l'}(kR_j)}{H_{l'}^{(1)}(ka_j)} \end{aligned}$$

An dieser Stelle lässt sich die Vollständigkeitsrelation der Besselfunktionen ausnutzen:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{m-l}(kR_j) J_{m-l'}(kR_j) = \delta_{ll'}$$

Somit folgt für $D^j \odot C^j$:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} D_{lm}^j C_{ml'}^j = -2i \frac{J_l(ka_j)}{H_{l'}^{(1)}(ka_j)} \delta_{ll'} \quad (\text{A.5.2})$$

Berechnung von $M^{jj'} - iD^j \odot C^{j'}$

Für die Berechnung von $\det_l S^{(n)}$ nach (2.3.6) kann nun die oben hergeleitete Beziehung für $D^j \odot C^{j'}$ verwendet werden, um den Ausdruck $X^{jj'} \equiv M^{jj'} - iD^j \odot C^{j'}$ zu berechnen. Nach dem Einsetzen der Ausdrücke (A.3.16), (A.5.1) und (A.5.2) ergibt sich:

$$\begin{aligned} X_{mm'}^{jj'} &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} + (1 - \delta_{jj'}) \frac{a_j}{a_{j'}} (-1)^{m'} \frac{J_m(ka_j)}{H_{m'}^{(1)}(ka_{j'})} H_{m-m'}^{(1)}(kR_{jj'}) e^{i(m\alpha_{jj'} - m'\alpha_{jj'})} \\ &\quad - i(-2i) \left\{ \left(\frac{a_j}{a_{j'}} \right) \frac{J_m(ka_j)}{H_{m'}^{(1)}(ka_{j'})} J_{m-m'}(kR_{jj'}) e^{i(m\alpha_{jj'} - m'\alpha_{jj'})} (-1)^{m'} \right. \\ &\quad \left. + \frac{J_m(ka_j)}{H_{m'}^{(1)}(ka_j)} \delta_{mm'} \right\} \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \left(1 - 2 \frac{J_m(ka_j)}{H_{m'}^{(1)}(ka_j)} \right) + \left(\frac{a_j}{a_{j'}} \right) \frac{J_m(ka_j)}{H_{m'}^{(1)}(ka_{j'})} (-1)^{m'} e^{i(m\alpha_{jj'} - m'\alpha_{jj'})} \\ &\quad \times (1 - \delta_{jj'}) \left\{ H_{m-m'}^{(1)}(kR_{jj'}) - 2J_{m-m'}(kR_{jj'}) \right\} \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Beziehung $H_m^{(2)}(\rho) = 2J_m(\rho) - H_m^{(1)}(\rho)$ kann oben stehender Ausdruck weiter vereinfacht werden:

$$\begin{aligned} X_{mm'}^{jj'} &= -\delta_{jj'}\delta_{mm'}\frac{H_{m'}^{(2)}(ka_{j'})}{H_{m'}^{(1)}(ka_{j'})} - \left(\frac{a_j}{a_{j'}}\right)\frac{J_m(ka_j)}{H_{m'}^{(1)}(ka_{j'})}(-1)^{m'}e^{i(m\alpha_{j'}-m'\alpha_{jj'})} \\ &\quad \times (1 - \delta_{jj'})H_{m-m'}^{(2)}(kR_{jj'}) \end{aligned} \quad (\text{A.5.3})$$

Berechnung von $S_{ml}^{(1)}$

Es folgt eine Nebenrechnung zur Berechnung der Streumatrix für ein 1-Disc-Problem in der Eigenbasis, d.h. $R_1 = 0$, die Disc befindet sich im Koordinatenursprung:

$$S_{ml}^{(1)} = \delta_{ml} - i \sum_{m',l'} C_{mm'}^{(1)} (M^{-1})_{m'l'}^{(1)(1)} D_{l'l}^{(1)}$$

Mit Hilfe der Gleichungen (A.3.15), (A.3.16) und (A.4.3) folgt:

$$\begin{aligned} C_{mm'}^{(1)} &= e^{im\varphi_{R_1}} \frac{2i}{\pi a_1} \frac{J_{m-m'}(kR_1)}{H_{m'}^{(1)}(ka_1)} \stackrel{R_1=0}{=} e^{im\varphi_{R_1}} \frac{2i}{\pi a_1} \frac{\delta_{mm'}}{H_{m'}^{(1)}(ka_1)} \\ M_{m'l'}^{(1)(1)} &= \delta_{m'l'} \\ D_{l'l}^{(1)} &= -\pi a_1 J_{l-l'}(kR_1) J_{l'}(ka_1) e^{-il\varphi_{R_1}} \\ &\stackrel{R_1=0}{=} -\pi a_1 \delta_{ll'} J_{l'}(ka_1) e^{-il\varphi_{R_1}} \end{aligned}$$

Es folgt für $S_{ml}^{(1)}$:

$$\begin{aligned} S_{ml}^{(1)} &= \delta_{ml} + i \sum_{m',l'} e^{im\varphi_{R_1}} \frac{2i}{\pi a_1} \frac{\delta_{mm'}}{H_{m'}^{(1)}(ka_1)} \delta_{m'l'} \pi a_1 \delta_{ll'} J_{l'}(ka_1) e^{-il\varphi_{R_1}} \\ &= 1 - 2 \frac{J_l(ka_1)}{H_l^{(1)}(ka_1)} = -\frac{H_l^{(2)}(ka_1)}{H_l^{(1)}(ka_1)} \delta_{ml} \end{aligned} \quad (\text{A.5.4})$$

Berechnung von $\det_l S^{(n)}$

Mit Hilfe des Rechenergebnisses für $S_{ml}^{(1)}$ wird sich $X_{mm'}^{jj'}$, später entscheidend vereinfachen lassen. Hierbei werden außerdem weitere elementare Eigenschaften der Bessel- und Hankelfunktionen ausgenutzt:

$$H_{-n}^{(1)/(2)}(\rho) = (-1)^n H_n^{(1)/(2)}(\rho) = H_n^{(1)/(2)}(-\rho) \quad (\text{A.5.5})$$

$$J_{-m}(\rho) = (-1)^m J_m(\rho) = J_m(-\rho) \quad (\text{A.5.6})$$

$$H_n^{(2)*}(\rho) = H_n^{(1)}(\rho^*) \quad (\text{A.5.7})$$

$$J_m^*(\rho) = J_m(\rho^*) \quad (\text{A.5.8})$$

In einem weiteren Zwischenschritt wird der Ausdruck für die komplex konjugierte Matrix $\left(M_{-m,-m'}^{jj'}(k^*)\right)^*$ des komplex konjugierten Argumentes berechnet. Bei der Umformung des Ausdrucks wird Gebrauch von den Relationen (A.5.5) bis (A.5.8) gemacht.

$$\begin{aligned} \left(M_{-m,-m'}^{jj'}(k^*)\right)^* &= \delta_{jj'}\delta_{mm'} + (1 - \delta_{jj'}) \frac{a_j}{a_{j'}} (-1)^{-m'} \frac{J_{-m}^*(k^* a_j)}{H_{-m'}^{(1)*}(k^* a_{j'})} \\ &\quad H_{-(m-m')}^{(1)*}(k^* R_{jj'}) e^{-i(-ma_{j'} + m' a_{jj'})} \\ &= \delta_{jj'}\delta_{mm'} + (1 - \delta_{jj'}) \frac{a_j}{a_{j'}} (-1)^{-m'} \frac{(-1)^{-m}}{(-1)^{m'}} \frac{J_m(ka_j)}{H_{m'}^{(2)}(ka_{j'})} \\ &\quad (-1)^{m'-m} H_{m-m'}^{(2)}(k R_{jj'}) e^{i(ma_{j'} - m' a_{jj'})} \end{aligned} \quad (\text{A.5.9})$$

Nun wird das Produkt der Ausdrücke (A.5.4) und (A.5.9). Als Ergebnis der Produktbildung stellt sich die bekannte Matrix $X_{mm'}^{jj'}$ heraus.

$$\begin{aligned} S_{mm'}^{(1)}(ka_{j'}) \left(M_{-m,-m'}^{jj'}(k^*)\right)^* &= -\frac{H_l^{(2)}(ka_1)}{H_l^{(1)}(ka_1)} \delta_{jj'}\delta_{mm'} - (1 - \delta_{jj'}) \frac{a_j}{a_{j'}} \frac{J_m(ka_j)}{H_{m'}^{(1)}(ka_{j'})} \\ &\quad H_{m-m'}^{(2)}(k R_{jj'}) (-1)^{-m'} e^{i(ma_{j'} - m' a_{jj'})} \\ &= X_{mm'}^{jj'} \end{aligned}$$

Als Ergebnis ergibt sich eine komprimierte Schreibweise für $X_{-m-m'}^{jj'}$:

$$X_{-m,-m'}^{jj'} = \sum_{\tilde{j}} \sum_{\tilde{m}} \left(M_{m\tilde{m}}^{j\tilde{j}}\right)^* \delta_{\tilde{j}j'} \delta_{\tilde{m}m'} S_{-m',-m'}^{(1)}$$

Für die Determinante von X folgt:

$$\text{Det}_L X(k) = \text{Det}_L M(k^*)^\dagger \left(\prod_{j=1}^n \det_l S^{(1)}(ka_j) \right) \quad (\text{A.5.10})$$

Das Einsetzen von (A.5.10) in (2.3.6) führt nun endlich auf die zu berechnende Determinante der S -Matrix:

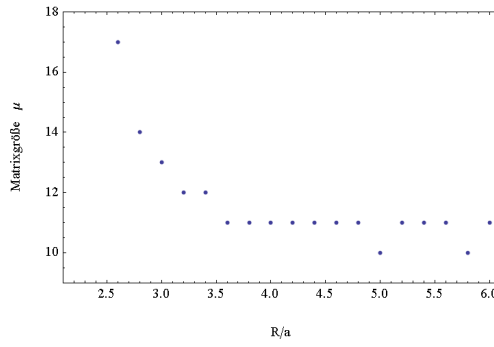
$$\det_l S^{(n)}(k) = \frac{(\text{Det}_L M(k^*)^\dagger)}{\text{Det}_L M(k)} \left(\prod_{j=1}^n \det_l S^{(1)}(ka_j) \right) \quad (\text{A.5.11})$$

Hierbei gelten bezüglich der Indizes l und L die in Abschnitt 2.3 vereinbarten Konventionen.

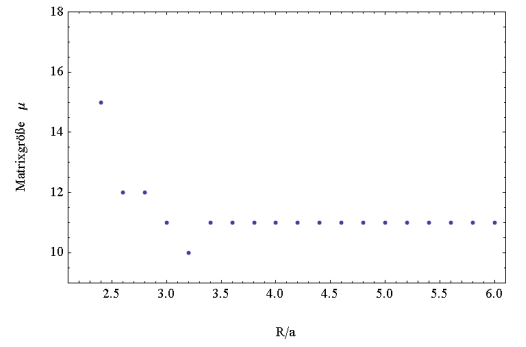
B. Genauigkeitsabschätzungen der Numerik

B.1. Konvergenzverhalten der Matrixdeterminanten

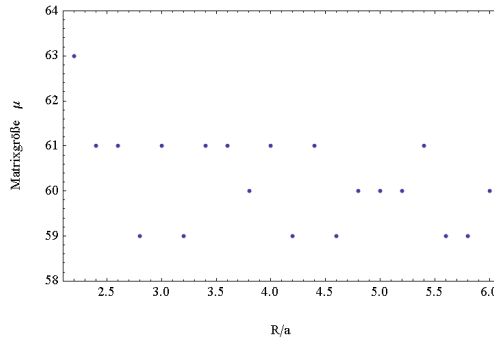
Wie in Kapitel 4.1 bereits beschrieben, werden die Matrizen der drei unterschiedlichen C_{3v} -Repräsentationen A_1 , A_2 und E durch quadratische Matrizen innerhalb der Schranken $-\mu \leq m, m' \leq +\mu$ bezüglich der $\tilde{M}^{(E)}(ka)$ -Matrix und innerhalb der Schranken $1 \leq m, m' \leq +\mu$ bezüglich der Matrizen $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ und $\tilde{M}^{(A_2)}(ka)$ genähert.



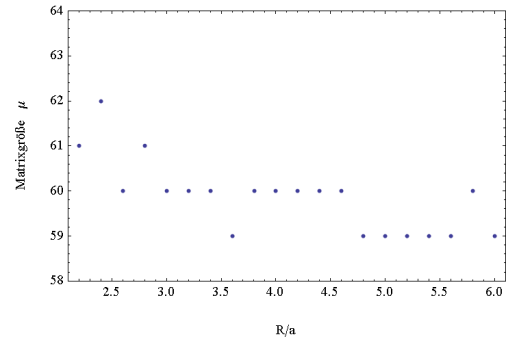
(a) $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ für $ka = 5.0$



(b) $\tilde{M}^{(E)}(ka)$ für $ka = 5.0$



(c) $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ für $ka = 50.0$



(d) $\tilde{M}^{(E)}(ka)$ für $ka = 50.0$

Abbildung B.1.: Konvergenzverhalten der Matrizen $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ und $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ in Abhängigkeit von R/a

Die Konvergenz der zugehörigen Determinantenfunktionen $\det\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$, $\det\tilde{M}^{(A_2)}(ka)$ sowie $\det\tilde{M}^{(E)}(ka)$ lässt sich in Abhängigkeit des Disc-Abstands zu Disc-Radius-Verhältnisses R/a und in Abhängigkeit des Argumentes ka testen. Im Folgenden wurde auf Grund der Ähnlichkeit der A_1 - und A_2 -Darstellungen nur die Konvergenz der $\tilde{M}^{(E)}(ka)$ - und $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ -Matrizen untersucht.

Abb. B.1 zeigt die nötige Matrixgröße μ zur Sicherstellung der Konvergenz der Determinantenfunktion bis zur 4. Nachkommastelle für die A_1 - und E -Repräsentation für die Argumente $ka = 5.0$ und $ka = 50.0$ in Abhängigkeit von R/a zwischen $2.2 \leq R/a \leq 6.0$. Wie in Kapitel 4.1 dargestellt, nimmt die nötige Matrixgröße μ im Bereich kleiner R/a für kleine ka zu. Im Bereich großer ka bleibt die nötige Matrixgröße μ im betrachteten R/a -Bereich sehr stabil.

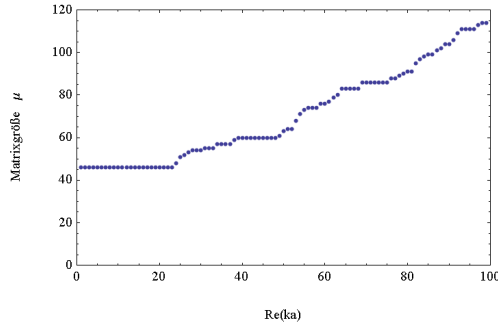
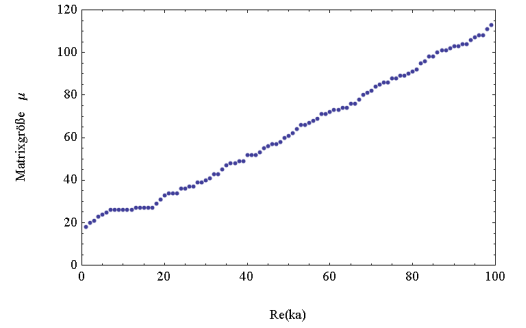
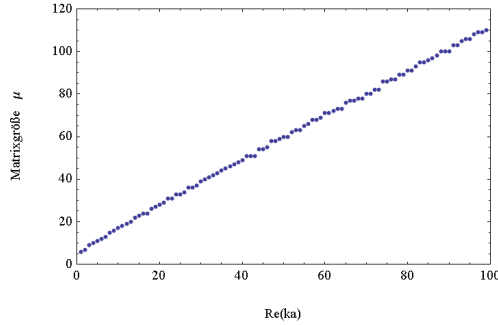
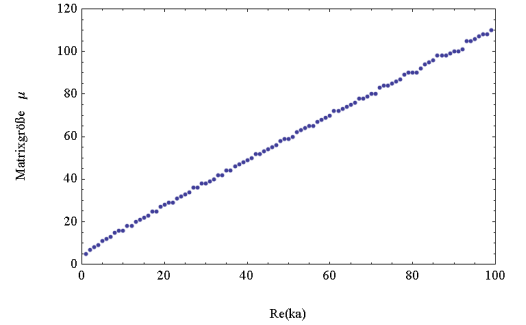

 (a) $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ für $R/a = 2.2$

 (b) $\tilde{M}^{(E)}(ka)$ für $R/a = 2.2$

 (c) $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ für $R/a = 6.0$

 (d) $\tilde{M}^{(E)}(ka)$ für $R/a = 6.0$

 Abbildung B.2.: Konvergenzverhalten der Matrizen $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ und $\tilde{M}^{(A_1)}(ka)$ in Abhängigkeit von ka

In Abb. B.2 wurde die nötige Matrixgröße μ zur Sicherstellung der Konvergenz der Determinantenfunktion bis zur 4. Nachkommastelle für die A_1 - und E -Repräsentation für Faktoren $R/a = 2.2$ und $R/a = 6.0$ in Abhängigkeit von ka zwischen $1.0 \leq ka \leq 100.0$ dargestellt. Wiederum ist für kleine R/a ein größeres μ notwendig, um die Konvergenz sicherzustellen.

Insgesamt zeigt sich ein nahezu linearer Anstieg von μ mit wachsendem ka . Die geringfügig kleineren μ bezüglich der E -Repräsentation täuschen über die Tatsache hinweg, dass die $\tilde{M}^{(E)}(ka)$ -Matrix circa viermal mehr Matrixelemente enthält als die Matrizen der A_1 - und A_2 -Repräsentationen. Tatsächlich sind für eine genügende Konvergenz also wesentlich größere $\tilde{M}^{(E)}(ka)$ -Matrizen notwendig. Der Rechenaufwand zur Berechnung der entsprechenden Resonanzen steigt daher für die E -Darstellung immens an.

Die ermittelten Konvergenzschranken bilden somit die Grundlage aller weiteren Rechnungen.

B.2. Genauigkeit der Besselfunktionen

Die Genauigkeit der Berechnung der Besselfunktionswerte stellt die Basis zur Ermittlung aller weiteren Werte dar. Die mit Hilfe von [1] implementierten Besselfunktionen werden nicht-rekursiv, auf Grundlage, der in [3] beschriebenen Methoden, berechnet. Eine genaue Erläuterung dieser Verfahren soll an dieser Stelle unterbleiben.

Die Präzision der in Abschnitt 4.2 für das Rechenprogramm implementierten Besselfunktionen wurde durch Einsetzen der numerischen Werte in die Besselsche-Differentialgleichung ([2]) getestet:

$$z^2 \frac{d^2 f(z)}{dz^2} + z \frac{df(z)}{dz} + (z^2 - n^2) = 0 \quad (\text{B.2.1})$$

Hierbei ist $z \in C$, $f : C \rightarrow C$, $f \in C^n$ und im betrachteten Fall ist $n \in N$. Unter Ausnutzung der Rekursionsbeziehungen für die gewöhnlichen Besselfunktionen ([2]):

$$J'_n = \frac{1}{2} (J_{n-1} - J_{n+1}) \quad (\text{B.2.2})$$

Lässt sich Beziehung (B.2.1) umschreiben in:

$$\frac{z^2}{4} (J_{n-2} - 2J_n + J_{n+2}) + \frac{z}{2} (J_{n-1} - J_{n+1}) + (z^2 - n^2) = 0 \quad (\text{B.2.3})$$

Die verwendeten Besselfunktionen (aus [1]) ergaben über alle n und den gesamten interessierenden Argumentebereich eine sehr gute Lösung der Bessel-DGL (B.2.1) mit einer Genauigkeit von mindestens 10^{-8} . Die verwendeten Besselfunktionen erfüllen die geforderten Genauigkeitsansprüche, die Sicherheit der Ergebnisse auf mindestens 2 Nachkommastellen ist gewährleistet.

B.3. Vergleich der numerischen Rechnung

Die im Bereich $8 \leq ka \leq 18$ ermittelten Resonanzen wurden mit den in [4] ermittelten verglichen. Eine grafische Gegenüberstellung zeigt Abb. B.3. Im betrachteten Intervall ergab sich eine gute Übereinstimmung mit den Werten von [4]. Alle Resonanzen wurden wiedergefunden und keine zusätzlichen Werte traten auf.

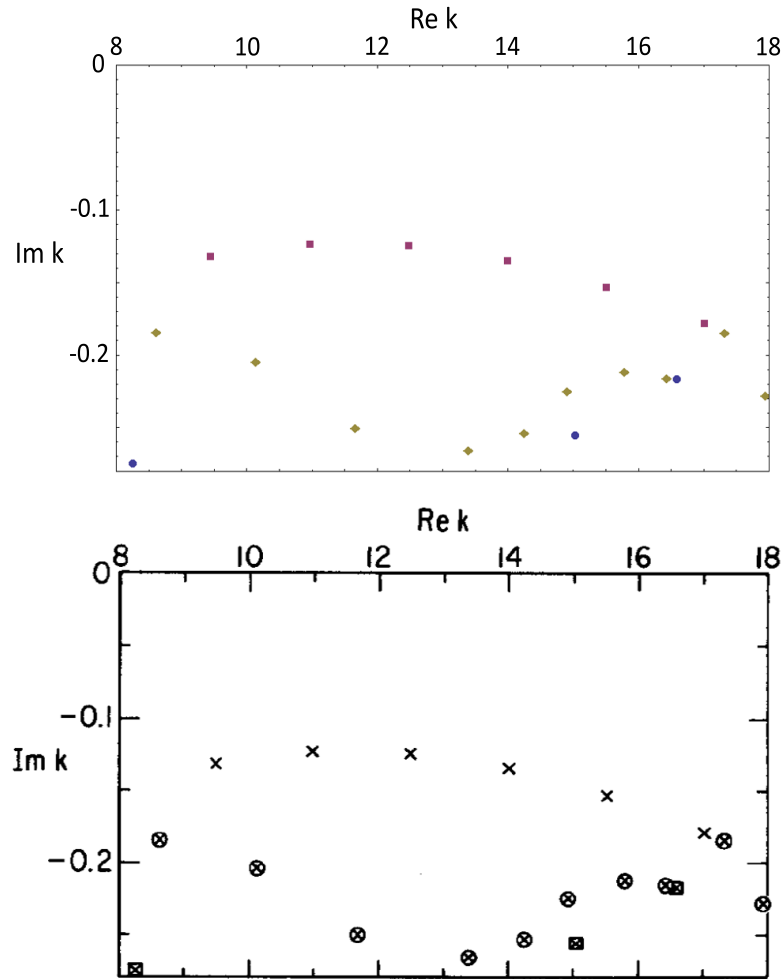


Abbildung B.3.: Vergleich der berechneten Resonanzen (oben) mit Ref. [4] (unten), im oberen (unteren) Plot wurden die einfachen Pole der A_1 -Repräsentation als blaue Kreise (durch \boxtimes), die einfachen Pole der A_2 -Repräsentation als rote Quadrate (durch \times) und die zweifachen Pole der E-Repräsentation als braune Rauten (durch \otimes) gekennzeichnet

Literaturverzeichnis

- [1] TbcI templated c++ numerical library, version 2.6.1. Website, 2009. Verfügbar auf <http://plasimo.phys.tue.nl/TBCI/>, Stand: 31. Mai 2010.
- [2] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, New York, 1970.
- [3] DE Amos. Algorithm 644: A portable package for Bessel functions of a complex argument and nonnegative order. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 12(3):265–273, 1986.
- [4] P. Gaspard and S. A. Rice. Scattering from a classically chaotic repeller. *J. Phys. C*, 90:2225, 1988.
- [5] W. T. Lu, S. Sridhar, and M. Zworski. Fractal Weyl laws for chaotic open systems. *Phys. Rev. Lett.*, 91:154101, 2003.
- [6] Herb Swan Marcus Hennecke, Ross Moore. More properties of hankel and bessel functions. Website, 2001. Verfügbar auf <http://www.math.ohio-state.edu/~gerlach/math/BVtypset/node127.html>, Stand: 31. Mai 2010.
- [7] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik-Methoden und Anwendungen*. Springer Verlag, 2006.
- [8] A. Potzuweit. Mikrowellenmessungen an n-Scheiben Streusystemen. Master’s thesis, Philipps-Universität Marburg, 2009.
- [9] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical recipes: the art of scientific computing*. Cambridge Univ Pr, 2007.
- [10] H. Weyl. Über die Randwertaufgabe der Strahlungstheorie und asymptotische Spektralgesetze. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 143:177, 1913.
- [11] A. Wirzba. Quantum mechanics and semiclassics of hyperbolic n -disk scattering systems. *Phys. Rep.*, 309:1, 1999.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich meine Bachelorarbeit mit dem Thema:

„Berechnung der quantenmechanischen Resonanzen in n-Disc-Systemen“

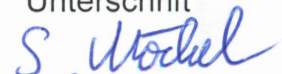
selbständig verfasst sowie alle wesentlichen Quellen und Hilfsmittel angegeben habe.

Name, Vorname: Möckel, Sebastian

Ort, Datum

Marburg, 17. Juni 2010

Unterschrift



Einverständniserklärung

Ich erkläre mich damit einverstanden, dass die vorliegende Arbeit

„Berechnung der quantenmechanischen Resonanzen in n-Disc-Systemen“

Kurztitel

in Bibliotheken allgemein zugänglich gemacht wird. Dazu gehört, dass sie

- von der Bibliothek der Einrichtung, in der ich meine Arbeit angefertigt habe, zur Benutzung in ihren Räumen bereit gehalten wird,
- in konventionellen und maschinenlesbaren Katalogen, Verzeichnissen und Datenbanken verzeichnet wird,
- der UB für die lokale Benutzung und für Fernleihzwecke zur Verfügung steht,
- im Rahmen der urheberrechtlichen Bestimmungen für Kopierzwecke genutzt werden kann.

Marburg, 17. Juni 2010

S. Mochel

.....
Unterschrift der Autorin/des Autors

U. Kuhn

.....
Unterschrift der betreuenden Hochschul-
lehrerin/des betreuenden Hochschullehrers